

УТВЕРЖДАЮ:
Проректор МГУ имени
М.В. Ломоносова,
Начальник управления
научной политики

д.ф.-м.н., профессор А.А. Федянин



« 17 » октября 2022 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу
Джимака Степана Сергеевича

«Закономерности динамики состояний группы гетерогенных конденсированных веществ при модификации изотопного состава среды и внешнем механическом воздействии», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Актуальность диссертационной работы. Диссертация Джимака С.С. посвящена одному из актуальных направлений – разработке методов прогнозирования механических движений гетерогенных конденсированных сред (на примере дезоксирибонуклеиновой кислоты) при внешнем периодическом воздействии и модификации изотопного состава среды. В работе решается ряд актуальных задач, таких как: разработка основ новой теории, объясняющей изменение энергии химической связи между парами стабильных изотопов и создание методов прогнозирования механических движений дезоксирибонуклеиновой кислоты при изменении состояния внешней среды, внешнем механическом воздействии, модификации изотопного состава среды.

Научная новизна диссертационной работы состоит в следующем:

1. Впервые с помощью механической математической модели дезоксирибонуклеиновой кислоты показано, что присутствие дейтерия в последовательности нуклеотидов может приводить – в зависимости от

значения энергии разрыва водородной связи – как к увеличению, так и уменьшению вероятности возникновения открытых состояний.

2. На основе разработанной физико-математической модели дезоксирибонуклеиновой кислоты доказано, что вероятность образования пузырьков денатурации определенной длины зависит от локализации атома дейтерия в молекуле дезоксирибонуклеиновой кислоты и может существенно отличаться от вероятности возникновения открытых состояний в целом, кроме того установлена зависимость частоты и амплитуды собственных колебаний молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты как от специфичной последовательности нуклеотидов, так и от различной длины гомологичных последовательностей.

3. Создана промышленная установка для производства обедненной дейтерием воды на основе физико-химического способа разделения изотопов водорода.

4. Разработан новый метод количественного определения концентрации ^2H с помощью ЯМР спектроскопии и применением лантаноидного сдвигающего реагента, добавляемого в зонд в качестве внешнего ЯМР стандарта.

Достоверность и обоснованность полученных результатов и выводов работы достигнуты путем использования широко известных и распространенных математических методов анализа и физико-математического описания процессов, протекающих в гетерогенных конденсированных средах. Полученные теоретические результаты согласуются с известными литературными данными.

Выносимые на защиту научные положения, достаточно полно отражены в 55 работах, 21 из которых опубликована в научных изданиях, входящих в перечень рекомендованных ВАК и в библиографические базы Scopus и Web of Science. Получены 3 патента на изобретения РФ, зарегистрированы 4 свидетельства о государственной регистрации программы ЭВМ.

Научная ценность работы состоит в теоретическом и экспериментальном исследовании закономерности динамики механических движений молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты при внешнем механическом воздействии и вариации изотопного состава среды. Разработана новая теория, объясняющей физические механизмы, обуславливающие изменение энергии химической связи при наличии нескомпенсированного нейтрона в парах стабильных изотопов.

Практическая значимость и рекомендации по использованию результатов. Полученные результаты диссертационной работы нашли свое применение в создании физико-математической модели позволяющей

производить расчеты влияния различных концентраций дейтерия в окружающей молекулу дезоксирибонуклеиновой кислоты среде на возникновение разрывов водородных связей между парами азотистых оснований (получены 4 свидетельства о государственной регистрации программы ЭВМ). Создана промышленная установка для снижения концентрации дейтерия в неорганических жидкостях и разработан новый метод определения концентрации дейтерия в жидких средах с помощью ЯМР спектроскопии (3 патента на изобретения РФ). Результаты работы включены в программу дисциплины «Экология стабильных изотопов» магистерской подготовки по направлению 03.04.03 «Радиофизика (радиофизические методы по областям применения (экология))». Кроме того, полученные разработки могут представлять особый интерес для учреждений Российской академии наук, ИОФ РАН (Москва), ФИ РАН (Москва), МИФИ (Москва), МИСиС (Москва), ИФМ РАН (Нижний Новгород), ИФП СО РАН (Новосибирск), ЮФУ (Ростов-на-Дону), ЮНЦ РАН (Ростов-на-Дону), НИИ «Полус» (Москва), ЗАО «Телеком-СТВ» (Зеленоград), ОАО «Сатурн» (Краснодар), а также в других научных и образовательных учреждениях.

Значимость диссертационной работы для развития физики конденсированного состояния. В представленной работе на основе математической модели, использующей аналогию между молекулой дезоксирибонуклеиновой кислоты и механической системой, состоящей из двух цепочек взаимосвязанных маятников, исследована динамика молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты, обусловленная вращательным движением азотистых оснований вокруг пентозо-фосфатного двунитевого остова. Исследовано влияние на динамику молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты таких факторов, как вязкость среды, внешнее периодическое воздействие, изотопный состав среды. Изучено влияние на характер решения неоднородности цепочки азотистых оснований, свойства связи в комплементарных парах и образование открытых состояний. Установлено, что такие упрощения модели, как усреднение характеристик цепочки азотистых оснований или упрощение вида связи в их комплементарных парах существенно влияют на вид решения, снижая достоверность получаемых результатов. Показано, что под влиянием внешней периодической силы молекула дезоксирибонуклеиновой кислоты может совершать колебательные движения с характерной для этой молекулы специфической частотой, которая отличается от частоты внешнего воздействия ω . Установлено, что частота колебаний молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты зависит от последовательности нуклеотидов. С помощью разработанной математической модели, описывающей вращательное движение азотистых оснований вокруг

сахаро-фосфатной цепочки, можно рассчитывать частоту и амплитуду колебаний отдельного участка дезоксирибонуклеиновой кислоты.

Соответствие диссертационной работы и автореферата критериям Положения о присуждении ученых степеней.

Представленная диссертационная работа соответствует требованиям Паспорта научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, а полученные результаты в полной мере удовлетворяют следующим направлениям исследований:

- пункту 1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений как в кристаллическом (моно- и поликристаллы), так и в аморфном состоянии, в том числе композитов и гетероструктур, в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» (исследовано влияние изотопного состава внешней среды на динамику дезоксирибонуклеиновой кислоты);

- пункту 2 «Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств упорядоченных и неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы, дисперсные и квантовые системы, системы пониженной размерности» (обнаружена следующая закономерность – изотопные эффекты в органических системах могут возникать в случаях образования химических связей между стабильными изотопами при суммарном количестве нейтронов больше, чем протонов на нечетное число, т.е. при наличии в системе нечетного числа нескомпенсированных нейтронов);

- пункту 5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» (разработана физико-математическая модель, использующая аналогию между молекулой дезоксирибонуклеиновой кислоты и механической системой состоящей из двух цепочек взаимосвязанных маятников, позволяющая исследовать динамику молекулы, вероятность образования открытых состояний и пузырьков денатурации в зависимости от механических внешних воздействий, вязкости и изотопного состава среды);

- пункту 6 «Разработка экспериментальных методов изучения физических свойств и создание физических основ промышленной технологии получения материалов с определенными свойствами» (создана высокоэффективная установка для производства обедненной дейтерием воды

и разработан новый метод количественного определения ^2H в диапазоне концентрации дейтерия в жидких средах с помощью ЯМР спектроскопии).

Диссертационная работа Джимака С.С. содержит новые научные результаты и положения. Содержание отражено на 263 страницах и сопровождается 70 рисунками и 15 таблицами. Наличие некорректного заимствования материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования не обнаружено.

Автореферат диссертации по содержанию, актуальности, цели, задачам, разработанности темы исследования, научной новизне, теоретической и практической значимости соответствует диссертации.

Основные положения, выносимые на защиту обоснованы и полностью раскрыты.

Основные замечания по диссертационной работе:

1. В работе представлены данные численных расчетов на основе математической модели по влиянию вязкости среды на амплитуду угловых отклонений азотистых оснований, однако отсутствуют данные о влиянии вязкости на изменение энергии разрыва водородных связей, вероятность возникновения открытых состояний и пузырьков денатурации.
2. Для простоты восприятия работы следовало бы каждую главу начинать с формулировки решаемых в ней задач.
3. Исходные коды компьютерных программ, написанных автором и использованных для численных расчетов динамики дезоксирибонуклеиновой кислоты, желательнее было представить в приложении.

Отмеченные замечания не являются критическими, не снижают ценности полученных результатов и не сказываются на высоком уровне проведенных исследований.

Общее заключение по диссертационной работе.

Диссертационная работа «Закономерности динамики состояний группы гетерогенных конденсированных веществ при модификации изотопного состава среды и внешнем механическом воздействии» Джимака Степана Сергеевича по своему содержанию, актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (пп. 9–14), утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор – Джимака Степан Сергеевич заслуживает присуждения

ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Джимака С.С. и отзыв о ней заслушаны и обсуждены на научном семинаре физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» 11.10.2022 г., протокол № 27.

Отзыв составлен:

Зав. кафедрой биофизики
д.ф.-м.н., профессор

Твердислов В.А.



Зав. кафедрой общей физики
и физики конденсированного состояния
д.ф.-м.н., профессор, чл.-корр. РАН

Хохлов Д. Р.



Декан физического
факультета МГУ
д. ф.-м.н., проф.



Сысоев Н. Н.



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» 119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, тел.: +7 (495) 939-10-00, факс: +7 (495) 939-01-26, e-mail: info@rector.msu.ru, www.msu.ru