

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию Джимака Степана Сергеевича

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

Актуальность исследований. Исследование динамики механических движений гетерогенных конденсированных сред в зависимости от внешнего воздействия имеет ряд приложений в различных областях науки. Например, уже сейчас известны различные математические модели динамики дезоксирибонуклеиновой кислоты, но не все они могут быть применены для прогнозирования её колебательных движений при вариации вязкости и изотопного состава внешней среды. В работе Джимака С.С. предложена новая физико-математическая модель динамики дезоксирибонуклеиновой кислоты. Акцент сделан на исследование влияния изотопного ($^2\text{H}/^1\text{H}$) состава среды на показатели механических движений азотистых оснований двухцепочечной молекулы, прочности этой молекулы и резистентности к внешним повреждающим факторам. Полученные данные могут быть использованы, например, в молекулярной электронике, экологии клетки или нанотехнологиях, что, несомненно, говорит об **актуальности** данной работы. Важно отметить, что результаты проведенного исследования получены в рамках реализации Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ, а также проектов, поддержанных различными фондами, что также указывает на практическую актуальность и значимость диссертационного исследования.

Достоверность и обоснованность результатов обеспечивается строгостью постановок и физико-математических методов решения задач,

использованием взаимодополняющих независимых экспериментальных методов. Важно отметить, что часть теоретических результатов диссертации согласуются с экспериментальными данными других авторов.

Научная и практическая значимость работы обусловлена разработкой новой физико-математической модели дезоксирибонуклеиновой кислоты; проведением численных экспериментов по исследованию эффектов, вызванных изменением вязкости среды и внешним торсионным воздействием на физические параметры органической молекулы, состоящей из двух цепочек взаимосвязанных маятников; созданием программного комплекса для расчета влияния изотопного $^2\text{H}/^1\text{H}$ состава среды на вероятность возникновения разрывов водородных связей между парами комплементарных маятников двухцепочечной молекулы; исследованием механизма, обуславливающего изменение энергии химической связи при наличии нескомпенсированного нейтрона в парах стабильных изотопов; разработкой новой методики определения концентрации стабильных изотопов в жидких средах на основе ЯМР спектроскопии.

Диссертационная работа Джимака С.С. состоит из введения, пяти разделов, заключения и списка цитируемой литературы из 311 наименований. Работа изложена на 263 страницах.

Во **введении** автором обоснована актуальность работы, сформулированы основные цели и задачи диссертационной работы, приведены основные научные положения, выносимые на защиту, обоснована новизна и практическая значимость исследования.

В первой главе приведены основные физико-математические модели динамики дезоксирибонуклеиновой кислоты, например, модель Ингландера, Пейярда-Бишопа или модель Л.В. Якушевич. Проведен анализ работ, посвященных исследованию физических эффектов, возникающих при модификации изотопного состава сред. Обоснована необходимость создания теории, описывающей возможные механизмы изотопных эффектов.

Во второй главе подробно рассмотрена физико-математическая модель динамики дезоксирибонуклеиновой кислоты, а также изучено влияние различных упрощений на результаты расчетов. Для описания вращательных движений азотистых оснований вокруг пентозо-фосфатных нитей использована аналогия между молекулой дезоксирибонуклеиновой кислоты и механической системой, состоящей из двух цепочек взаимосвязанных маятников. Вращающимся маятникам соответствуют азотистые основания, а упругой нити, к которой прикреплены эти маятники, – пентозо-фосфатные цепочки молекулы; водородной связи пары комплементарных азотистых оснований соответствует упругая связь пары маятников. Показано, что вероятность образования зон с деформированными водородными связями (открытые состояния) зависит от содержания пар А-Т на участке локализации внешнего торсионного момента, а также от размера этого участка и от величины времени воздействия. Установлено, что пространственная локализация внешнего торсионного момента вблизи концов молекулы приводит к увеличению вероятности возникновения зон открытых состояний (концевой эффект), при этом такие зоны могут закрываться при прекращении торсионного воздействия.

Третья глава посвящена исследованию закономерностей влияния изотопного состава среды на энергию разрыва водородных связей в молекуле дезоксирибонуклеиновой кислоты. Для моделирования процессов образования открытых состояний и пузырьков денатурации в двойной спирали дезоксирибонуклеиновой кислоты за основу была взята физико-математическая модель, описанная во второй главе. В модель введен коэффициент, позволяющий учитывать наличие дейтериевой связи. Поведение такой механической системы, состоящей из n пар маятников, описывается задачей Коши для системы $2n$ обыкновенных дифференциальных уравнений. Расчеты проведены с помощью метода Рунге-Кутты. В результате проведенных расчетов установлено, что присутствие дейтерия в последовательности нуклеотидов может приводить (в

зависимости от значения энергии разрыва водородной связи) как к увеличению, так и к уменьшению вероятности возникновения открытых состояний. Также было рассмотрено влияние концентрации дейтерия в окружающей молекулу дезоксирибонуклеиновой кислоты среде на вероятность возникновения открытых состояний. Показано, что вероятность возникновения открытых состояний между азотистыми основаниями в двухцепочечной молекуле дезоксирибонуклеиновой кислоты зависит от концентрации дейтерия в жидкой среде, окружающей молекулу, и от величины энергии разрыва водородных связей.

Четвертая глава диссертационной работы Джимака С.С. посвящена анализу закономерностей неравновесного распределения стабильных изотопов в гетерогенных системах и изменению физических свойств конденсированных веществ. Автором установлена следующая закономерность: к изменению энергии химической связи между парой стабильных изотопов приводит наличие в системе нечетного количества некомпенсированных нейтронов. Анализ литературных данных, проведенный автором, показывает, что наличие в среде подобных изотопных пар с некомпенсированным нейтроном приводит к изменению активности гетерогенных систем.

В пятой главе приводятся экспериментальные результаты, доказывающие практическую значимость диссертационной работы. Разработан метод количественного определения изотопов ^2H и ^{17}O с помощью ЯМР спектроскопии и применения лантаноидного сдвигающего реагента, добавляемого в зонд в качестве внешнего ЯМР стандарта, относительно которого проводится измерение. Данный подход позволяет упростить и ускорить выполнение экспериментов, связанных с определением изотопного состава веществ. Также Джимаком С.С. разработана установка для получения обедненной дейтерием воды. Кроме того, проведены эксперименты по изучению влияния вариации изотопного состава среды на

органические системы. Доказано, что при модификации изотопного состава среды наблюдается изменение активности микроорганизмов.

В заключении перечислены основные результаты проведенных исследований, научная новизна и значимость которых не вызывает сомнений.

Автореферат диссертационной работы в полной мере отражает ее содержание.

По диссертационной работе есть ряд замечаний, носящих рекомендательный характер:

1. В главах 2 и 3 автор проводил расчеты для достаточно коротких молекул, содержащих 10, 980 и 5000 маятников. Как известно, молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты могут содержать на порядок большее число пар азотистых оснований. В диссертации нет данных о масштабировании модели для расчетов более длинных последовательностей.
2. При исследовании влияния вязкости внешней среды, окружающей молекулу дезоксирибонуклеиновой кислоты, указаны лишь относительные величины. Однако, не указаны абсолютные значения вязкости внешней среды.
3. Раздел «теоретические исследования влияния ВЧ- и СВЧ-воздействия на природу изменений собственной частоты колебаний молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты» вполне можно было дополнить экспериментальными исследованиями, так как генераторы ВЧ- и СВЧ-колебаний доступны для использования.
4. В разделе о механизмах, обеспечивающих изменение энергии химической связи между парами атомов стабильных изотопов, для получения аналитического решения автор делает ряд упрощений. Это позволило подтвердить теорию автора, однако, для получения более точных результатов требуется провести расчеты без упрощений.

5. Представленная работа может стать основой для проведения актуальных микробиологических исследований, в то же время, из материалов диссертации явно не следует существование совместных с представителями указанной области знаний проектов. Они могли бы не просто украсить диссертацию и придать ей более яркую практическую значимость, но и обеспечить достойную перспективу.
6. В диссертации присутствуют опечатки и неточности.

Приведенные замечания не затрагивают основных результатов и не снижают значимость проведенного исследования.

Диссертационная работа Джимака С.С. «Закономерности динамики состояний группы гетерогенных конденсированных веществ при модификации изотопного состава среды и внешнем механическом воздействии» является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором на высоком научном уровне. Положения, выносимые на защиту, представляют собой оригинальный научный результат, который является решением актуальной научной проблемы.

Тема и содержание диссертационной работы соответствуют специальности 1.3.8 физика конденсированного состояния. Основные положения доложены на международных и всероссийских конференциях. Результаты проведенных исследований опубликованы в 21 статье в научных изданиях, входящих в перечень, рекомендованных ВАК, а также в библиографические базы Scopus и Web of Science. Получены 3 патента на изобретения РФ, зарегистрированы 4 свидетельства о государственной регистрации программы ЭВМ.

Диссертационная работа «Закономерности динамики состояний группы гетерогенных конденсированных веществ при модификации изотопного состава среды и внешнем механическом воздействии» Джимака Степана Сергеевича соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г. а ее автор – Джимака Степан Сергеевич - заслуживает

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

Даю согласие на обработку своих персональных данных.

Официальный оппонент –
доктор физико-математических наук
(1.3.8 – физика конденсированного состояния),
Научно-исследовательский
институт физики ФГАО ВО
«Южный федеральный университет»
директор НИИ физики



Вербенко Илья Александрович

« 10 » 11 2022 г.

НИИ физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет» 344090, г.
Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194, тел.: +78632433676, факс: +78632434044,
ilich001@ya.ru, <https://ip.sfedu.ru>