

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию Елкиной Анны Анатольевны

«Влияние изотопного состава среды на физические параметры гетерогенных систем», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Актуальность темы исследования

В настоящий момент в научном сообществе возрастает интерес к изучению влияния стабильных изотопов биогенных элементов на гетерогенные системы. Экспериментально показано, что колебания концентраций стабильных изотопов (^2H , ^{13}C , ^{15}N , ^{18}O , ^{25}Mg , ^{34}S и др.) с различным количеством нейтронов являются основой для возникновения термодинамических и кинетических изотопных эффектов, которые, в свою очередь, сопровождаются замедлением или ускорением физико-химических процессов. В связи с чем, актуальность диссертационного исследования определяется необходимостью проведения фундаментальных исследований, посвященных изучению физических механизмов влияния среды с модифицированным по концентрации стабильных тяжелых изотопов составом на гетерогенные системы.

В данном диссертационном исследовании установлено, что возникновение изотопных эффектов в гетерогенных системах характерно в случаях, когда существует вероятность образования в среде связей с количеством нейтронов больше, чем протонов на нечетное число или при наличии в системе химического элемента, имеющего нескомпенсированный нейтрон/нейтроны. Кроме того, установлено, что физические процессы и эффекты, вызванные воздействием модификации изотопного состава внешней среды на гетерогенные системы обусловлены изменением энергии ковалентной связи в случае наличия нескомпенсированного нейтрона в паре ядер. Дано физико-математическое обоснование наблюдаемых явлений. Показано, что изменение энергии ковалентной связи в случае наличия нескомпенсированного нейтрона в паре ядер зависит от взаимодействия магнитных моментов ядер атомов, приводящего к изменению расстояния между ними (дано аналитическое решение) и влияния размеров ядра на энергию валентного электрона (дано аналитическое решение). На примере математической модели, описывающей вращательное движение азотистых оснований вокруг сахарофосфатной цепи молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты в конденсированном состоянии показано, что присутствие атома дейтерия в последовательности нуклеотидов за счет изменения энергии водородных связей между парами азотистых оснований, приводит к увеличению либо уменьшению вероятности возникновения областей денатурации различной длины. Кроме того, в рамках данного исследования проведено экспериментальное исследование влияния изотопного состава жидких сред на физические параметры гетерогенных систем.

Новизна научных результатов

В рамках данного диссертационного исследования доказано, что:

- возникновение нейтронного эффекта в гетерогенных системах наблюдается при наличии ковалентных связей между атомами, у которых имеется суммарное преобладание нейтронов над протонами, выражаемое нечетными положительными числами (1, 3, 5, 7 и т.д.): $N_n - N_p = 2k + 1$, где $k \in \mathbb{Z}$, n – нейтрон, p – протоны;

- вероятность образования длинных областей с разорванными водородными связями зависит от места локализации атома дейтерия в последовательности нуклеотидов в молекуле дезоксирибонуклеиновой кислоты в конденсированном состоянии;

- впервые получены экспериментальные результаты о влиянии изотопного состава среды от 10 до 150 ppm по дейтерию на уровень выделения CO_2 в органических системах, что указывает не только на их научную и на практическую значимость.

Практическая значимость результатов

В диссертационном исследовании разработан метод практического применения изменения изотопного состава ($^2\text{H}/^1\text{H}$) сред гетерогенных систем. Установлено, что интенсивность появления изотопных эффектов варьируется в зависимости от их концентрации: при высоких концентрациях изотопов $^2\text{H}/^1\text{H}$, преимущественно реализуются их термодинамические и кинетические эффекты, тогда как при низких концентрациях этих же изотопов возрастает вероятность образования резонансных пар с дальнейшим возникновением валентного изотопного нейтронного эффекта, позволяющего дополнительно реализовывать туннелирование, что приводит к появлению аномальных изотопных эффектов в одних и тех же гетерогенных системах.

Достоверность полученных результатов и обоснованность положений

Обоснованность и достоверность полученных результатов и выносимых на защиту научных положений диссертационной работы не вызывает сомнения и обеспечивается корректностью применения широкого комплекса современных высокоэффективных методов теоретических и экспериментальных исследований, сопоставлением полученных данных с экспериментальными исследованиями, опубликованными в научных периодических изданиях. Достоверность полученных результатов подтверждается использованием современных аттестованных методик исследований с применением методологически поверенной, сертифицированной в соответствии с российскими и международными стандартами измерительной аппаратуры, а также согласованностью полученных автором результатов между собой.

Общая характеристика диссертационной работы
Диссертационная работа состоит из введения, четырех разделов, заключения и списка цитируемой литературы. Объем диссертационной работы составляет 131 страница. Список литературы содержит 224 источника.

Во **введении** обосновывается актуальность, значимость, новизна темы диссертационной работы, формулируются цели и задачи, основные положения, выносимые на защиту, обосновывается достоверность полученных результатов.

В **первой главе** диссертационной работы проведено исследование влияния физических параметров на скорость химических реакций в конденсированных средах и гетерогенных системах, проведен анализ научной литературы, посвященной исследованию процессов динамики дезоксирибонуклеиновой кислоты и образованию областей денатурации.

Во **второй главе** изучено влияние некомпенсированного нейтрона на энергию химической связи между парами стабильных тяжелых изотопов. Доказано, что механизмом реализации нейтронного эффекта, является способность некомпенсированного нейтрона модифицировать спин ядра в атомах, а, следовательно, влиять и на реакционную способность химической связи, образуемой изотопами, имеющими суммарную некомпенсированность по нейтронам.

В **третьей главе** методами математического моделирования в рамках механической модели двухцепочечной молекулы были проведены оценочные эксперименты по влиянию изотопного обмена $^2\text{H}/^1\text{H}$ в водородных связях между парами азотистых оснований на неравномерное распределение вероятностей открытых состояний по длине последовательности полипептидов.

В **четвертой главе** описан метод практического применения модификации изотопного состава среды в гетерогенной системе. Экспериментально показано наличие эффектов, вызванных изменением в средах соотношения $^2\text{H}/^1\text{H}$ (от 10 до 150 ppm), формируемого парой изотопов с сильно различающимися массами и широко распространённых в живых системах.

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в ходе работы над диссертационным исследованием.

Диссертационное исследование полностью отражает значительный объем, сделанный в рамках теоретической и экспериментальной работы, на достаточно высоком научном уровне. Поставленные задачи решены комплексно с использованием широкого спектра современных методов исследования, в том числе построения адекватных математических моделей и их решения применительно к изучаемым процессам. Изложение материала выполнено автором последовательно и грамотно, что упрощает его понимание. Работа производит хорошее впечатление, как по ясности сформулированных выводов, так и по широте охвата изучаемых процессов. Важным, сточки зрения значимости выполненных исследований является и

то, что они поддержаны грандами Президента РФ и РФФИ, а также Госзаданием Минобрнауки.

Публикация основных результатов

Результаты данного диссертационного исследования опубликованы в научных изданиях, индексируемых в международных библиографических базах Scopus и Web of Science и рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации (3 статьи). Всего по теме исследования опубликовано 12 работ. Результаты диссертационного исследования были доложены на пяти международных и всероссийских конференциях. Личный вклад автора в проведенные совместно с соавторами исследования указан.

Замечания по диссертационной работе

1. В разделе 2.3 «Физико-математическое обоснование влияния нескомпенсированного нейтрона на энергию ковалентной связи» при проведении расчетов, автором работы сделано много упрощений. При этом, с одной стороны, автором доказано наличие описываемых в диссертационной работе эффектов, но с другой стороны, необходимо иметь более точное решение без упрощений.

2. В разделе 2.2 «Изучение влияния изотопного состава среды на изменение энергии химической связи гетерогенной системы» (таблица 2.1) не все приведенные данные имеют экспериментальное подтверждение.

3. В главе 3 «Физико-математическое моделирование и исследование процессов влияния $^2\text{H}/^1\text{H}$ соотношения в гетерогенных средах на энергию разрыва водородных связей в двухцепочечной молекуле» все расчеты проведены на основе механической модели, однако, очевидно, что для получения более точного решения необходимо проведение исследований с помощью полноатомного моделирования на суперкомпьютере.

Отмеченные замечания не ставят под сомнение полученные результаты, не снижают научной новизны и носят рекомендательный характер.

Заключение

По своему содержанию, научной новизне, практической значимости и достоверности полученных результатов диссертационная работа Елкиной А.А. «Влияние изотопного состава среды на физические параметры гетерогенных систем» представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, в которой содержится решение научной задачи, имеющей существенное значение для физики гетерогенных систем и их практического применения. В автореферате и опубликованных статьях полностью отражены основные результаты диссертационного исследования. Все основные выносимые на защиту научные положения и выводы обоснованы. Проведенные в работе исследования отвечают современному состоянию физики конденсированного состояния.

Диссертационная работа «Влияние изотопного состава среды на физические параметры гетерогенных систем» Елкиной Анны Анатольевны соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (пп. 9-14), утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г. а ее автор, Елкина Анна Анатольевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент –
доктор физико-математических наук,
профессор, ведущий научный сотрудник
кафедры экспериментальной физики
физико-технического факультета
Северо-Кавказского федерального
Университета г. Ставрополь



Дерябин Михаил Иванович
355000, г. Ставрополь, ул. Пушкина, 1
ФГАОУ ВО «Северо – Кавказский
федеральный университет»

Тел.(8652) 330283

E-mail: m.i.deryabin@rambler.ru

ПОДПИСЬ
УДОСТОВЕРЯЮ
начальник Управления
делами СКФУ



Чечева А. В.

09.12.14