

## **ОТЗЫВ**

официального оппонента

на диссертацию Елкиной Анны Анатольевны

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

### **Актуальность и практическая значимость исследования**

Диссертация Елкиной А.А. предлагает физические модели, затрагивающие сразу несколько областей, в частности – физику конденсированного состояния и физическую химию. Изотопные эффекты, рассматриваемые автором, влияют на кинетические и термодинамические показатели гетерогенных систем. Необходимость понимания физических механизмов, лежащих в основе такого влияния – в подсистеме (т.е. на уровне именно физических, а не химических или более высокоуровневых процессов), – делает рассматриваемую работу актуальной. Особую значимость она представляет для биофизики: в настоящее время интердисциплинарные исследования, касающиеся органических соединений и наносистем, весьма востребованы из-за нарастающей мировой потребности в высокотехнологичном здравоохранении. Практическое применение результатов диссертационного исследования позволит не только влиять на скорость физико-химических процессов в гетерогенных системах, но и качественно менять активность таких систем.

### **Научная новизна**

В диссертации демонстрируется и физически описывается влияние замены стабильных изотопов на физико-химические свойства органических полимеров. Впервые предлагаются физические и математические модели, обосновывающие это влияние, ранее описанное исключительно экспериментально. Отдельно следует отметить проведение автором численного эксперимента, демонстрирующего механику построенной модели.

**Обоснованность и достоверность** полученных результатов и выносимых на защиту научных положений диссертационной работы обусловлена использованием известных методов и моделей, внутренней непротиворечивостью исследования и соответствия его результатов известным экспериментальным данным. Математические и численные методы, применённые автором (разложение по малому параметру, линеаризация уравнений, явная конечноразностная схема,  $\chi^2$ -критерий и др.), хорошо известны и широко апробированы, в то время как применимость

физической модели (основанной на ньютоновской механике) проверяется по данным, представленным в открытой печати. Автор демонстрирует хороший кругозор, в том числе в смежных областях знания.

### **Личный вклад автора**

Постановка исследовательских задач и интерпретация их результатов выполнены лично автором. Некоторые из физических моделей, а также методика численного моделирования, разработаны в соавторстве с другими исследователями, что отражено в тексте работы.

### **Оценка содержания диссертационной работы**

Диссертационная работа изложена на 131 странице и состоит из введения, четырёх разделов, заключения и списка цитируемой литературы из 224 источников.

Во введении обосновывается актуальность, значимость и новизна темы диссертационной работы, формулируются цель и задачи исследования, приводятся положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору публикаций по исследуемой проблеме. Перечислены основные физические эффекты, которые могут задействоваться при изменении изотопного состава, и очерчены границы их изученности применительно к гетерогенным системам.

Во второй главе показывается корреляция между изотопными эффектами и наличием нескомпенсированной массы, обусловленной нейтронным составом изотопов. Формулируется соответствующая гипотеза, и приводятся математические модели для её обоснования.

Третья глава посвящена практическому применению работы – предсказанию химической активности соединений с разным изотопным составом. Строится математическая модель полимерной молекулы и численно исследуется устойчивость её связей в зависимости от изотопного состава. Демонстрируется влияние замены H→D на стойкость водородных связей, приводятся параметры, позволяющие как уменьшить эту стойкость, так и увеличить её.

Четвёртая глава также ориентирована на практическое применение и целиком посвящена демонстрации изменения биологической активности микроорганизмов в зависимости от изотопного состава воды. Автор неявно предполагает, что развитию микроорганизмов благоприятствует большая устойчивость молекул дезоксирибонуклеиновой кислоты к разрыву водородных связей (это предположение, однако, подтверждается цитируемыми в разделе 2.2 работами), и на этом основании демонстрирует применимость полученных ранее результатов.

В заключении автор перечисляет полученные качественные результаты.

## **Публикация результатов исследования**

Диссертация опирается на 12 работ автора, три из которых опубликованы в изданиях, индексируемых международными библиографическими базами Scopus и Web of Science и рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации. Результаты диссертационного исследования также прошли апробацию на пяти международных и всероссийских конференциях.

## **Замечания по диссертационной работе**

1. Некоторые физико-математические модели предлагаются автором концептуально, без предоставления в тексте диссертации числовых результатов. Например, в разделе 2.3 было бы желательно оценить хотя бы относительную величину поправок к модельным значениям межатомного расстояния и энергии связи (заодно показав, что они действительно малы) – это упростит дальнейшие исследования в данном направлении. Актуальность данного замечания возрастает в свете того, что в формуле (2.30) автором допущена опечатка, препятствующая получению читателями правильных количественных результатов без тщательного анализа предыдущих выкладок.

2. Применяя две различные формулы для оценки энергии связи (упрощённую формулу (2.4) и потенциал Леннарда-Джонса), автор не сравнивает в тексте диссертации результаты, получаемые при их помощи. Как следствие, обоснованность применения той или иной формулы не является очевидной.

3. Формулировка о приближённом равенстве изменения межатомного расстояния и изменения амплитуды его колебаний, приведённая в конце раздела 2.3, вызывает сомнения. Если колебания являются гармоническими (что ранее упоминается в тексте), то их амплитуда не может напрямую влиять на среднее значение расстояния.

4. Текст работы содержит ряд небрежностей и опечаток, в том числе:

а) при анализе формулы (2.17) автор приводит неудачное математическое обоснование малости членов – оно неявно опирается на малость величины  $1/r$  (что неочевидно, т.к. автор не приводит характерного размера);

б) в разделе 2.3 изменённое значение энергии связи  $U(r+\Delta r)$  обозначается как её приращение  $\Delta U$ ;

в) в разделе 3.1 индексы  $i_{\min}$  и  $i_{\max}$  явно не определены, поэтому их значение приходится угадывать по контексту. То же касается множеств «Минимум» и «Максимум» в разделе 3.2.

