

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по стратегическому
развитию и исследовательской
деятельности

ФГАОУ ВО
федеральный

«Южный
университет»
кандидат химических наук
Муханов Евгений Леонидович



«08» июля 2026 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации – Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» – на диссертационную работу Лясота Оксаны Михайловны «Исследование водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при воздействии внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды», представленную к защите в диссертационном совете 24.2.320.03 на базе ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Актуальность диссертационной работы. Диссертация Лясота О.М. посвящена одному из актуальных направлений – исследованию водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при внешних воздействиях. На сегодняшний день установлено, что механические нагрузки (растяжение, скручивание) преобразуются в энергию, разрывающую водородные связи между парами азотистых оснований двухцепочечной макромолекулы. Особую актуальность эти процессы приобретают при изучении патогенных повторов. Например, удлинение тринуклеотидного повтора CAG в гене *ATXN2* приводит к грубым нарушениям структуры дезоксирибонуклеиновой кислоты. Предсказание участков, склонных к разрывам водородных связей между парами комплементарных азотистых оснований, позволяет выявлять регуляторные элементы. Использование физико-математических моделей дезоксирибонуклеиновой кислоты предоставляет уникальный инструмент для

детального анализа разрывов водородных связей, расплетания спирали и структурных перестроек под действием внешних факторов.

Научная повизна диссертационной работы состоит в следующем:

Впервые предложена физико-математическая модель, позволяющая рассчитывать зоны локализации потенциальной энергии водородных связей, необходимой для инициирования их разрывов под действием внешнего крутящего момента определённой величины, а также прогнозировать места возникновения этих разрывов с учётом механических колебаний двухцепочечной макромолекулы (гена *ATXN2*).

Впервые выявлено, что число разорванных водородных связей растёт с увеличением количества тринуклеотидных повторов в определённом диапазоне, при этом обратная зависимость коррелирует с временем начала аномальных процессов в гетерогенных системах.

Впервые обнаружено, что замена гуанина на аденин в одном из тринуклеотидов двухцепочечной макромолекулы *ATXN2* (при разных значениях потенциальной энергии разрыва для пар А–Т и G–C) в зависимости от положения замены может как способствовать увеличению числа разрывов водородных связей (при заменах в одних позициях), так и приводить к их уменьшению (при заменах в других позициях).

Впервые изучено влияние однократной изотопной замены водорода на дейтерий в области тринуклеотидных повторов при воздействии внешнего крутящего момента заданной интенсивности на количество разрывов водородных связей в двухцепочечной макромолекуле (гене *ATXN2*). Установлено, что присутствие атома дейтерия в данной области снижает вероятность возникновения разрывов водородных связей.

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 конденсированных средах. Полученные теоретические результаты согласуются с известными литературными данными.

Выносимые на защиту научные положения достаточно полно отражены в 15 научных работах, включая 9 статей в российских и международных изданиях из списка ВАК, Белого списка научных журналов и библиографических баз Scopus, Web of Science и 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Научная ценность работы состоит в теоретическом исследовании водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при воздействии

внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды. Усовершенствована угловая физико-математическая модель, позволяющая исследовать распределение энергии между водородными связями после воздействия внешнего крутящего момента.

Практическая значимость и рекомендации по использованию результатов. Предложенная физико-математическая модель отражает поведение водородных связей в макромолекуле при разрушающем воздействии внешнего крутящего момента, величина которого соответствует экспериментально подтверждённым значениям. С помощью этой модели можно оценивать, как разное содержание дейтерия в окружающей среде влияет на вероятность разрыва водородных связей в молекуле дезоксирибонуклеиновой кислоты. Модель также позволяет предсказывать участки, наиболее подверженные таким разрывам, путём расчёта зон локализации потенциальной энергии. Полученные данные подтверждают необходимость изучения физико-химических параметров среды — например, вязкости и изотопного состава — как регуляторов структуры и динамики макромолекулы. Это имеет ключевое значение для сохранения генетической информации и для понимания механизмов развития нейродегенеративных заболеваний, включая спиноцеребеллярную атаксию, болезнь Альцгеймера и болезнь Паркинсона. Кроме того, полученные разработки могут представлять особый интерес для учреждений Российской академии наук, ИОФ РАН (Москва), ФИ РАН (Москва), МИФИ (Москва), ИФМ РАН (Нижний Новгород), ИФП СО РАН (Новосибирск), ЮФУ (Ростов-на-Дону), ЮНЦ РАН (Ростов-на-Дону), а также для других научных и образовательных учреждений.

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» (выполнены теоретические исследования физических свойств органического полимера на примере гена *ATXN2* в зависимости от изотопного состава и вязкости среды);

- 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» (проведены теоретические исследования физических свойств упорядоченной органической макромолекулы, состоящей из двух цепочек азотистых оснований, которые соединены в двойную спираль с помощью водородных связей);

- пункту 5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» (модифицирована физико-математическая модель органического полимера, состоящего из цепочек нуклеотидов, соединённых в двойную спираль водородными связями, позволяющая рассчитать места локализации потенциальной энергии водородных связей, необходимой для их разрывов при воздействии внешнего крутящего момента, в том числе при изменении изотопного состава и вязкости среды).

Диссертационная работа Лясота О.М. содержит новые научные результаты и положения. Содержание отражено на 148 страницах и сопровождается 46 рисунками и 4 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. Автором зарегистрирована программа для ЭВМ, с помощью которой были проведены численные расчеты по модернизированной модели. Однако исходный код программы не приведен в приложении к диссертационной работе.
2. Текст диссертационной работы хорошо выверен, однако для улучшения восприятия работы каждую главу следовало бы начинать с формулировки задач, решение которых в ней представлено.
3. В литературном обзоре не рассмотрен вопрос о стандартных программных продуктах – могут ли они позволить проводить подобные расчеты. В работе следовало бы акцентировать внимание

на этом. Существуют ли аналоги разработанной автором диссертационной работы программы для ЭВМ?

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 «Исследование водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при воздействии внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды» Лясота Оксаны Михайловны 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 – Лясота Оксана Михайловна - заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Отзыв подготовлен директором Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», доктором физико-математических наук Вербенко Ильей Александровичем.

Отзыв обсужден и одобрен на совместном научном семинаре отделов Интеллектуальных материалов и нанотехнологий и Рентгеновской спектроскопии Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО ЮФУ (Протокол № 4 от 19.05.2026).

Директор НИИ физики
ФГАОУ ВО «ЮФУ»,
доктор физ.-мат. наук

Вербенко Илья Александрович

08.06.2026

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет» (ФГАОУ ВО ЮФУ).

Адрес: 344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Б.Садовая, 105/42

<http://ip.sfedu.ru/>

Тел.: +7(863)3051990

E-mail: iphys@sfedu.ru

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Личную подпись Вербенко И. А.

ЗАВЕРЕНО:

Главный специалист по управлению персоналом

Шмураб Э. А.
08.06.2026 г.

