

УТВЕРЖДАЮ:

Первый проректор – проректор  
по научной работе ФГАОУ ВО  
«Российский университет дружбы  
народов»

А.А. Костин

« 19 » февраля 2021 г.



### ОТЗЫВ

ведущей организации – федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов» – на диссертационную работу Елкиной Анны Анатольевны «Влияние изотопного состава среды на физические параметры гетерогенных систем», представленную к защите в диссертационном совете Д 212.101.07 при ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

#### Актуальность темы диссертационной работы

Диссертационная работа А.А. Елкиной посвящена актуальной задаче – исследованию механизмов фракционирования стабильных изотопов в гетерогенных системах. Известно, что незначительное колебание изотопных соотношений в гетерогенных системах характеризуется достоверным изменением изотопного градиента на различных уровнях организации. В частности, термодинамическая неравноценность изотопных соединений приводит к неравномерному распределению изотопов водорода. Реакции изотопного обмена в гетерогенных системах сопровождаются изменением не только термодинамических, но прежде всего кинетических показателей на молекулярном уровне.

В научной литературе обсуждается несколько альтернативных механизмов объясняющих существенное влияние вариации тяжелых изотопов органических элементов на скорости процессов в каскадах биохимических реакций. Например, колебание содержания дейтерия в области его природного значения около 150 ppm могут влиять на способность их участия в жизненных процессах через хиральность биологических молекул. Другое объяснение ряда изотопных эффектов основана на представлении о резонансном туннелировании нейтронов. Наконец, наиболее интересны экспериментально подтвержденные

представления, которые развиваются в работах Р. Зубарева, которое возможно и инициировали работы над теоретической моделью представленную Елкиной А.А. на основе известных экспериментальных фактов.

Автором обсуждается следующая закономерность: возникновение изотопных эффектов в органических системах характерно в случаях, когда высока вероятность образования связей с количеством нейтронов больше, чем протонов на нечетное число (нескомпенсированным нейтроном/нейтронами) или при наличии в системе химического элемента, имеющего нескомпенсированный нейтрон/нейтроны. Теоретически доказано, что физические процессы и эффекты, вызванные воздействием модификации изотопного ( $^2\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{18}\text{O}$ ,  $^{34}\text{S}$  и др.) состава внешних сред на гетерогенные системы обусловлены изменением энергии ковалентной связи в случае наличия нескомпенсированного нейтрона в паре ядер.

Одним из способов теоретического изучения вышеописанных явлений является математическое моделирование. Так, на примере математической модели, использующей аналогию между молекулой дезоксирибонуклеиновой кислоты и механической системой, состоящей из двух цепочек взаимосвязанных маятников, позволяющей исследовать ее динамику, обусловленную вращательным движением азотистых оснований вокруг пентозо-фосфатного двунитевого остова Елкиной А.А. показано, что присутствие атома дейтерия в последовательности нуклеотидов за счет изменения энергии водородных связей между парами азотистых оснований, приводит – как к увеличению, так и уменьшению вероятности возникновения областей денатурации различной длины. В диссертационной работе соискателя предложена теоретическая модель влияния изотопного состава жидких сред на физические параметры гетерогенных систем. Для этого автором проанализированы: процессы фракционирования тяжелых нерадиоактивных изотопов, физические механизмы воздействия внешних сред с различным изотопным составом, вероятность разрыва водородных связей между парами азотистых оснований в дезоксирибонуклеиновой кислоте при внедрении атомов  $^2\text{H}$  в водородные связи. Выполнены экспериментальные исследования влияния модификации изотопного  $^2\text{H}/^1\text{H}$  состава внешней среды на внутренние характеристики двух представителей прокариот и эукариот.

#### **Характеристика диссертационной работы по главам**

Диссертационная работа Елкиной А.А. состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы, состоящего из 224 наименований. Общий объем диссертационной работы – 131 страница.

**Во введении** диссертационной работы обосновывается актуальность, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, определяются цель и задачи проводимого исследования.

**Первая глава** посвящена обзору влияния изотопного состава органогенных элементов на энергию химической связи и скорость химических реакций в гетерогенных системах. Проведен анализ физико-математических

моделей дезоксирибонуклеиновой кислоты и параметров, изменяющихся при модификации внешней среды.

**Во второй главе** исследовано влияния некомпенсированного нейтрона на энергию химической связи между парами стабильных изотопов. Предложенная модель, предполагающая изменение функциональной активности системы в случаях высокой вероятности образования связей с нечетным количеством нейтронов (некомпенсированным нейтроном) или при наличии в системе химического элемента, имеющего некомпенсированный нейтрон/нейтроны.

**В третьей главе** методами математического моделирования проведено исследование влияния  $^2\text{H}/^1\text{H}$  соотношения в гетерогенных средах на энергию разрыва водородных связей в двухцепочечной молекуле. Показано, что внедрение атома дейтерия влияет на образование областей с деформированными водородными связями определенной длины в большей степени, чем на образование открытых состояний.

**В четвертой главе** экспериментально изучено влияние модификации изотопного  $^2\text{H}/^1\text{H}$  состава среды в диапазоне от 10 до 150 ppm на уровень выхода  $\text{CO}_2$  в двух гетерогенных системах.

**В заключении** содержатся основные положения диссертации.

**Научная новизна исследования и полученных результатов**

- предположена, что возникновение изотопных эффектов в органических системах характерно в случаях высокой вероятности образования связей с количеством нейтронов больше, чем протонов на нечетное число (некомпенсированным нейтроном/нейтронами);

- с помощью математической модели, использующей аналогию между молекулой дезоксирибонуклеиновой кислоты и механической системой, состоящей из двух цепочек взаимосвязанных маятников, позволяющей исследовать ее динамику, обусловленную вращательным движением азотистых оснований вокруг пентозо-фосфатного двухнитевого остова установлено, что присутствие дейтерия в последовательности нуклеотидов приводит – как к увеличению, так и уменьшению вероятности возникновения областей с деформированными водородными связями различной длины.

**Научная ценность работы** состоит в изучении фракционирования тяжелых нерадиоактивных изотопов в гетерогенных системах, а также, в исследовании физических механизмов, обусловленных наличием некомпенсированного нейтрона и возникающих при воздействии модифицированных по изотопному составу внешних сред на гетерогенные системы. В результате работы разработана физико-математическая модель динамики молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты, с учетом энергии разрыва водородных связей и исследованы вероятности разрыва водородных связей по длине гена, вызванные изменением частоты колебаний азотистых оснований вокруг сахара-фосфатного остова при внедрении атома дейтерия в водородные связи между парами азотистых оснований молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты.

**Практическая значимость результатов работы** заключается в разработке метода наблюдения влияния вариаций изотопного состава ( $^2\text{H}/^1\text{H}$ ) воды на функционирование ряда гетерогенных систем. Показано наличие эффектов, вызванных изменением в средах соотношения  $^2\text{H}/^1\text{H}$ , как изотопов с наиболее сильно различающимися массами.

#### **Достоверность полученных результатов**

Достоверность полученных результатов достигается использованием современных материалов и методов при проведении работы и согласованностью полученных теоретических результатов с известными результатами, опубликованными отечественными и зарубежными авторами. Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждается тем, что они были представлены и приняты на международных и всероссийских конференциях и опубликованы в рецензируемых научных изданиях.

#### **Соответствие диссертационной работы паспорту специальности**

Представленная диссертация соответствует требованиям Паспорта научной специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, а полученные результаты в полной мере удовлетворяют формуле этой специальности:

«Основой специальности является теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях» (в диссертационной работе рассматриваются вопросы теоретического и экспериментального исследования влияния изотопного состава жидких сред на физические параметры гетерогенных систем).

Работа соответствует следующим областям исследований:

- пункту 1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления»,

- пункту 5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения».

#### **Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации**

Основные научные и практические результаты диссертационной работы могут быть рекомендованы для использования в исследовании процессов фракционирования стабильных изотопов в гетерогенных системах, а также для проведения экспериментальных исследований по влиянию модификации изотопного  $^2\text{H}/^1\text{H}$  состава внешней и внутренней сред на гетерогенные системы в ЮФУ (Ростов-на-Дону), ИОФ РАН (Москва), ЮНЦ РАН (Ростов-на-Дону), ФНЦ «Пищевых систем им. В.М. Горбатова» РАН (Москва), РУДН (Москва), Оренбургский государственный университет (Оренбург), Иркутский

государственный университет (Иркутск), Karolinska Institutet (Стокгольм, Швеция), Hydroisotop (Швайтенкирхен, Германия) и других научных и образовательных учреждениях.

### **Полнота опубликованных научных результатов и апробация**

Результаты 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. Все материалы диссертационного исследования полностью отражены в опубликованных работах. Результаты диссертационной работы прошли апробацию на пяти международных и всероссийских конференциях.

### **Замечания по диссертационной работе**

1. Автор неоднократно использует термины «изотопный эффект», «гетерогенные системы», «изотопный резонанс», «туннелирование», «гетерогенность», но не всегда уточняют смысл, который он вкладывает в это понятие. Следовало бы более подробно описать эффекты, которые имеются в виду в данной работе.

2. В диссертационной работе отсутствует список сокращений.

3. В главе 3 все расчеты проведены только для одной последовательности нуклеотидов. Не показано, какие результаты вероятности возникновения областей денатурации в цепочке могут быть получены для других последовательностей.

4. Не ясен смысл последнего абзаца главы 4. Полученные в этой главе результаты по дрожжевой культуре представляются малодоказательными.

5. В работе встречаются некоторые опечатки и неоднозначности. Так, на стр. 8 указано, что вероятность образования резонансных пар и валентного изотопного эффекта характерна для отклонения на  $\pm 9,5\%$  от природного уровня, который существенно разный – от 90 до 160 ppm содержания изотопа  $^2\text{H}$  в природной воде.

Отмеченные замечания не являются критическими, не снижают ценность полученных результатов и носят рекомендательный характер.

### **Общее заключение по диссертационной работе**

Диссертационная работа «Влияние изотопного состава среды на физические параметры гетерогенных систем» Елкиной Анны Анатольевны по своему содержанию, актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости представляет собой законченную научно-исследовательскую работу. Достоверность результатов работы не вызывает сомнений, сами результаты опубликованы и апробированы. Все основные выносимые на защиту научные положения и выводы обоснованы.

Диссертационная работа «Влияние изотопного состава среды на физические параметры гетерогенных систем» Елкиной Анны Анатольевны соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (пп. 9-

11, 13, 14), утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г. (ред. от 01.10.2018, с изм. от 26.05.2020), а ее автор, Елкина Анна Анатольевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Отзыв составлен директором Центра прецизионных инструментальных методов анализа («ПРИМА») ЦКП (НОЦ) РУДН доктором химических наук Геннадием Александровичем Калабиным, обсужден и одобрен на научном семинаре Центра прецизионных инструментальных методов анализа («ПРИМА») ЦКП (НОЦ) РУДН.

доктор химических наук, профессор,  
директор Центра прецизионных  
инструментальных методов анализа  
(«ПРИМА») ЦКП (НОЦ) РУДН



Калабин  
Геннадий Александрович

18.02.2021

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов» (ФГАОУ ВО РУДН)

Адрес: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6

<http://www.rudn.ru/>

Тел.: +7 495 434-53-00

E-mail: [rector@rudn.ru](mailto:rector@rudn.ru)

Подпись Калабина Геннадия Александровича заверяю.

Ученый секретарь Ученого Совета РУДН,  
профессор



Савчин Владимир Михайлович