

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.320.03,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 29.06.2026 № 26/03

О присуждении Лясота Оксане Михайловне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при воздействии внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды» по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния принята к защите 17 апреля 2026 года (протокол заседания № 26/02) диссертационным советом 24.2.320.03, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кубанский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149) в соответствии с приказами Минобрнауки России № 426-155 от 12.03.2010 г. (о создании) и № 561/нк от 03.06.2021 г. (об установлении полномочий).

Соискатель Лясота Оксана Михайловна, 15 февраля 1991 года рождения.

В 2014 году соискатель освоила программу специалитета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Кубанский государственный университет» по специальности 200402 Инженерное дело в медико-биологической практике. В период с 2014 по 2018 годы обучалась в аспирантуре по научной специальности «Физика конденсированного состояния».

В период подготовки диссертации и в настоящее время работает научным сотрудником в федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Федеральный исследовательский центр Южный научный центр Российской академии наук» — Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в лаборатории проблем распределения стабильных изотопов в живых системах, федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр Южный научный

центр Российской академии наук» — Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Джимаков Степан Сергеевич, ФГБУН «Федеральный исследовательский центр Южный научный центр Российской академии наук», лаборатория проблем распределения стабильных изотопов в живых системах, ведущий научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

1. **Першин Сергей Михайлович**, доктор физико-математических наук, Научный центр волновых исследований Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН, лаборатория лазерной спектроскопии, главный научный сотрудник,

2. **Шелистов Владимир Сергеевич**, кандидат физико-математических наук, Краснодарский филиал Финансового университета при Правительстве РФ, г. Краснодар, лаборатория электро- и гидродинамики микро- и наномасштабов, ведущий научный сотрудник

– дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет» (г. Ростов-на-Дону) – в своем положительном отзыве, подписанном директором НИИ физики, доктором физико-математических наук Вербенко И.А. и утвержденном проректором по стратегическому развитию и исследовательской деятельности, кандидатом химических наук Мухановым Е.Л., указала, что 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 её автор – Лясота Оксана Михайловна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 63 опубликованные работы, из них по теме диссертации – 15 работ, в том числе 9 статей в рецензируемых российских и международных изданиях из списка ВАК, Белого списка научных журналов и наукометрических библиографических баз Scopus и Web of Science, кроме того, зарегистрирована 1 программа для ЭВМ. Результаты доложены и обсуждены на 6 всероссийских и международных конференциях.

Все результаты получены соискателем лично, либо при его непосредственном участии. Наиболее значимые научные работы по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, а также в рецензируемых научных изданиях, включенных в наукометрические библиографические базы Scopus и Web of Science:

1. Джимаков С. С., Дроботенко М. И., Басов А. А., Свидлов А. А., Федулова Л. В., Лясота О. М., Барышев М. Г. Математическое моделирование возникновения открытых состояний в молекуле ДНК в зависимости от концентрации дейтерия в окружающей жидкой среде при разных значениях энергии разрыва водородной связи // Доклады Академии наук. — 2018. — Т. 483, № 5. — С. 564–566.

2. Елкина А.А., Яковенко Н.А., Барышев М.Г., Малышко В.В., Лясота О.М., Джимаков С.С. О механизмах, обуславливающих влияние модификации изотопного состава сред на физические параметры гетерогенных систем // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. — 2020. — Т. 17, № 4. — С. 33–42.

3. Lyasota O. M., Kopytov G. F., Leontyeva O. A., Moiseev A. V., Hernandez-Caceres H. L., Dorohova A. A. Hydrogen bond breakage in DNA molecules induced by nonuniform energy distribution // Russian Physics Journal. — 2025. — Vol. 68. — P. 2007–2013. — DOI: 10.1007/s11182-025-03646-2.

4. Drobotenko M., Lyasota O., Dzhimak S., Svidlov A., Baryshev M., Leontyeva O., Dorohova A. Localization of potential energy in hydrogen bonds of the ATXN2 gene // International Journal of Molecular Sciences. — 2025. — Vol. 26, No. 3. — P. 933. — DOI: 10.3390/ijms26030933.

5. Лясота О. М., Леонтьева О. А., Рубайло А. Д., Барышева Е. В., Козлова Е. А., Эрнандес Касерес Х. Л. Влияние изотопного H/D-обмена на стабильность САG-тракта гена ATXN2 при различных значениях вязкости внешней среды // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. — 2025. — Т. 22, № 4. — С. 62–68.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

доктора физико-математических наук, доцента, заведующего лабораторией биожидкостей федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», Кучумова А.Г. – положительный. В отзыве имеется замечание: «В автореферате имеются опечатки, не искажающие смысла текста и представленных графических материалов»;

кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт аналитического приборостроения Российской академии наук, Дроздова А.В. – положительный. В отзыве имеется замечание: «В выводах сказано, что D/H-замена в GC-парах стабилизирует CAG-тракт сильнее, чем в AT-парах. Не противоречит ли это утверждению, что «степень стабилизации не зависит от локализации D/H замены»? Возможно, речь о независимости от позиции вдоль повтора, а не от типа пары — это стоило бы уточнить в тексте.».

В отзывах официальных оппонентов и ведущей организации имеются следующие основные замечания:

1. Автором зарегистрирована программа ЭВМ, с помощью которой были проведены численные расчеты по модернизированной модели. Однако исходный код программы не приведен в приложении к диссертационной работе (в отзыве ведущей организации);

2. Текст диссертационной работы хорошо выверен, однако для улучшения восприятия работы каждую главу следовало бы начинать с формулировки задач, решение которых в ней представлено (в отзыве ведущей организации);

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 ЭВМ? (в отзыве ведущей организации);

4. В названии диссертации: «Исследование водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при воздействии внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды» было бы уместным вставить слово «.....при моделировании воздействия .....» (в отзыве официального оппонента Першина С.М.);

5. В параграфе 2.3 произведен расчет энергии водородных связей в парах А-Т и G-C, в параграфе 2.1 для расчетов использованы другие значения энергии. Автор оставляет этот факт без комментариев в тексте диссертации (в отзыве официального оппонента Першина С.М.);

6. Оформление рисунков в тексте диссертации выполнено не единообразно. Наиболее ярко это видно при сравнении рисунков 5 и 6 – размер шрифта в подписях осей значительно различается и в рисунке 6 его крайне трудно прочесть (в отзыве официального оппонента Першина С.М.);

7. В рамках численного моделирования автор сводит механику системы к решению задачи Коши и заявляет использование метода Рунге – Кутты четвёртого порядка аппроксимации. В работе отмечаются ограничения на шаг по времени, однако совершенно отсутствует информация о пространственной дискретизации уравнений и численной устойчивости выбранного метода (судя по тексту, явного). Кроме того, на многих графиках, приведённых в диссертации, указывается характерное время, равное 1,0 нс, но его физический смысл явно не описан. Такая информация, хоть и не влияет непосредственно на получаемые результаты, позволила бы дать более полную оценку достоверности расчётов (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

8. На стр. 36-37 указано, что «вероятность разрыва водородных связей между азотистыми основаниями в случае внедрения даже одного атома дейтерия в молекулу дезоксирибонуклеиновой кислоты превышает вероятность аналогичного разрыва в той же молекуле, содержащей только атомы протия», поскольку отношение соответствующих вероятностей строго больше единицы. Но является ли указанное превышение значимым? Например, во втором столбце табл. 2 указаны вероятности, превышающие 1 только в пятом знаке после запятой – это превышение или численная погрешность? (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

9. На стр. 40 делается предположение, что «разрыв в парах оснований возникает, если потенциальная энергия связи в этих парах превышает некоторое критическое значение  $E_{кр}$ , если же потенциальная энергия в паре с разорванной связью становится меньше  $E_{кр}$ , то связь восстанавливается». Это предположение не учитывает возможного гистерезиса, и автором не цитируются явно работы, показывающие отсутствие такового (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

10. На стр. 77 выбор места замены протия на дейтерий обосновывается неустойчивостью полиглутаминового тракта при замене нуклеотида в данном месте. Далее автор показывает, что наличие дейтерия стабилизирует тракт. Возникает вопрос: что будет, если замены нуклеотида и изотопа произойдут одновременно? (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

11 а. На графиках, подобных рис. 2, область разрывов при достаточно больших временах выглядит сплошной. Это, действительно, так, или же возможны ситуации, когда между двумя разрывами сохраняются отдельные водородные связи? (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

11 б. На рис. 4 и 16(б) указаны одинаковые параметры модели, при этом сами рисунки различаются. Чем обусловлено это отличие? (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

11 в. На рис. 23 расположение разрыва отмечено тем же символом  $k$ , что и длина нуклеотидного тракта. Если здесь нет опечатки, какой параметр показывает, что разрыв оказывается в центре или на краю тракта? (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

11 г. На рис. 28 график 5 описан «как среднее значение графиков 2,3 и 4», но в экземпляре диссертации оппонента его конец расположен ниже остальных графиков. Нет ли в графике ошибки? Аналогично, в тексте заявлено наличие на рис. 29 черной линии, но оппонент ее не видит (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.);

12. Кроме того, есть некоторые нарекания к структуре (в частности, раздел 4.1 представляется оппоненту ближе по содержанию к 3.4, нежели к 4.2 и последующим) и оформлению работы (имеются неудачные формулировки и опечатки) (в отзыве официального оппонента Шелистова В.С.).

Соискатель ответила на вопросы и замечания по диссертации и автореферату, сделанные ведущей организацией, официальными оппонентами и специалистами в данной области, привела собственную аргументацию в интерпретации полученных результатов, а также согласилась с замечаниями стилистического и оформительского характера.

Все отзывы положительные, в них отмечается актуальность и сложность выбранной проблемы диссертационного исследования, научная новизна и достоверность, теоретическая и практическая значимость полученных результатов.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается наличием компетенций в области физики конденсированного состояния, численных методов и математического моделирования. Указанные компетенции подтверждаются наличием публикаций оппонентов и сотрудников ведущей организации в областях исследований, связанных с тематикой диссертационной работы. Это обеспечивает квалифицированную оценку научной новизны, достоверности результатов и практической значимости диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

**разработаны** модифицированная физико-математическая модель двухцепочечной макромолекулы для расчёта мест локализации потенциальной энергии водородных связей, необходимой для формирования их разрывов при воздействии внешнего крутящего момента в диапазоне от 8,28 пН·нм до 8,62

пН·нм, и программа для ЭВМ, позволяющая проводить расчёты количества разрывов водородных связей с учётом внутренних физических процессов и внешних воздействий (внешний крутящий момент, модификация изотопного состава среды);

**предложены** оригинальная научная гипотеза о влиянии локализации единичных замен изотопов водорода (дейтерий/протий) и нуклеотидов (замена гуанина на аденин) в области тринуклеотидных повторов на частоту генерации разрывов водородных связей в гене ATXN2, а также подход к прогнозированию мест зарождения разрывов водородных связей с помощью расчёта мест локализации потенциальной энергии водородных связей в двухцепочечной макромолекуле;

**доказаны** перспективность использования разработанной физико-математической модели в практике прогнозирования участков, склонных к образованию разрывов водородных связей в органическом полимере, наличие закономерности возрастания количества дополнительных разорванных водородных связей с увеличением числа тринуклеотидных повторов (от 35 до 65) и корреляция обратной им величины со временем начала аномальных процессов в гетерогенных системах, а также связь между локализацией замены гуанина на аденин в тринуклеотидных повторах и количеством дополнительных разрывов водородных связей (замены в 5, 10 и 15 тринуклеотиде увеличивают количество разрывов, замены в 20, 25 и 30 тринуклеотиде уменьшают);

**новые термины и понятия** не вводились.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

**доказаны** корреляция между количеством тринуклеотидных повторов (от 35 до 65) и числом дополнительных разорванных водородных связей в двухцепочечной макромолекуле гена ATXN2, распределение потенциальной энергии водородных связей, необходимой для формирования их разрывов при воздействии внешнего крутящего момента в диапазоне от 8,28 пН·нм до 8,62 пН·нм, зависимость количества разрывов водородных связей от локализации замены гуанина на аденин в тринуклеотидных повторах;

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс существующих базовых методов исследования, включая угловую модель Якушевич Л.В. для описания угловых движений азотистых оснований, численные методы решения задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (метод Рунге–Кутты 4-го порядка аппроксимации);

**изложены** положения о влиянии единичных изотопных D/H замен на частоту генерации единичных и множества смежных разрывов водородных связей в гене

ATXN2, идеи о том, что степень стабилизации CAG-тракта при D/H-замене не зависит от позиции внедрения дейтерия вдоль повтора, аргументы о наличии зависимости количества разрывов водородных связей от локализации замены нуклеотидов в тринуклеотидных повторах;

**раскрыты** существенные проявления теории: выявление новых проблем влияния физико-химических факторов окружающей среды (вязкость, изотопный состав) на регуляцию структуры и динамики органической макромолекулы;

**изучены** корреляция между количеством тринуклеотидных повторов и временем начала аномальных процессов в гетерогенных системах, генезис процесса формирования разрывов водородных связей под действием внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды, причинно-следственные связи между локализацией потенциальной энергии водородных связей и местами зарождения разрывов;

**проведена** модернизация существующих математических моделей, включая модификацию угловой модели Якушевич Л.В. для расчёта областей локализации потенциальной энергии водородных связей, необходимой для формирования их разрывов при воздействии внешнего крутящего момента.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

**разработаны и внедрены** программа для ЭВМ (Лясота О. М., Дорохова А. А., Дроботенко М. И., Джимаков С. С. Программа для расчёта открытых состояний в последовательности ДНК в зависимости от длины тринуклеотидных повторов: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № RU 2025618875 / заявка № 2025617199; заявл. 01.04.2025; опубл. 08.04.2025), позволяющая проводить расчёты количества разрывов водородных связей с учётом внутренних физических процессов и внешних воздействий (внешний крутящий момент, модификация изотопного состава среды), и модифицированная физико-математическая модель двухцепочечной макромолекулы для расчёта мест локализации потенциальной энергии водородных связей и прогнозирования участков, склонных к образованию разрывов; отдельные результаты были получены в ходе выполнения работ в качестве исполнителя в следующих проектах: грант Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых МК-3359.2017.4 «Математическое моделирование влияния изотопного D/H обмена на динамику нитей ДНК»; РФФИ № 19-44-230026 р\_а «Математическое моделирование возникновения открытых состояний в молекуле ДНК при изотопном D/H замещении в водородных связях между парами азотистых оснований»; РНФ 24-14-20014; ГЗ № 122020100351-9; ГЗ

№ 125011700394-5; грант Минобрнауки в форме субсидии на проведение научных работ с организациями Республики Куба № 075-15-2025-283; крупный научный проект № 075-15-2024-528.

**определены** перспективы практического использования результатов исследования для прогнозирования мест, склонных к образованию разрывов водородных связей в гетерогенных системах; перспективы включают использование разработанной модели для оценки влияния концентраций дейтерия в окружающей среде на вероятность образования разрывов водородных связей макромолекулы;

**создана** модифицированная физико-математическая модель макромолекулы, состоящей из цепочек нуклеотидов, соединённых в двойную спираль водородными связями для прогнозирования участков, склонных к образованию разрывов, с помощью расчёта мест локализации потенциальной энергии;

**представлены** теоретические и прикладные аспекты процессов разрыва и восстановления водородных связей в двухцепочечных макромолекулах;

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

**для экспериментальных работ** результаты получены на основе численного моделирования с использованием апробированных методов и моделей (угловая модель Якушевич Л.В., метод Рунге–Кутты 4-го порядка);

**теория** построена на известных, проверяемых данных и фактах (физико-химические параметры пар оснований А-Т и G-C из работы Л.В. Якушевич, экспериментально измеренные значения крутящего момента  $11 \pm 4$  пН·нм);

**идея базируется** на анализе практики исследования водородных связей в двухцепочечных макромолекулах, обобщении передового опыта применения угловой модели Якушевич Л.В. для описания угловых движений азотистых оснований, учета влияния внешнего крутящего момента и модификации изотопного состава среды на стабильность двухцепочечной макромолекулы;

**использованы** сравнение авторских данных и данных, полученных ранее по рассматриваемой тематике (работы Л.В. Якушевич, исследования влияния дейтерия на водородные связи в органической макромолекуле);

**установлено** качественное и количественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике;

**использованы** современные методики сбора и обработки исходной информации, методы математического моделирования.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии во всех этапах выполнения диссертационного исследования: постановке цели и задач работы,

определении объекта и предмета исследования, выборе методологического подхода, соответствующего поставленной научной проблеме. Соискатель выполнила сбор, систематизацию и анализ исходных данных, провела численные расчеты и обработку полученных результатов. Особое внимание уделялось интерпретации выявленных закономерностей, сопоставлению их с литературными данными и формулированию научных выводов.

Кроме того, соискатель участвовала в разработке структуры диссертации, подготовке иллюстративного материала, таблиц и графиков, а также в написании текстов научных статей и диссертационной работы. В случае совместных публикаций соискателю принадлежат результаты, относящиеся к постановке задачи, выполнению расчетов, анализу полученных данных и обсуждению результатов. Таким образом, личный вклад соискателя носит определяющий характер и обеспечивает научную новизну, достоверность и практическую значимость полученных результатов.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания:

Дейтерий попал в САГ канал, сколько времени он будет там существовать? (д. ф.-м. н., профессор Богатов Н.М.); подробнее про модель: откуда она взялась, что означают слагаемые и как она сформировалась? (д. ф.-м. н., профессор Глушков Е.В.); на слайде присутствуют не все уравнения? (д. ф.-м. н., доцент Павлова А.В.); макет модели есть, он раньше был выведен, и она сертифицирована? (д.ф.-м.н., академик РАН Бабешко В.А.).

Соискатель Лясота О.М. ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию:

- Попадание дейтерия происходит именно в процессе раскрытия пар, соответственно при следующем раскрытии, т.к. данные процессы очень быстрые, возможна замена водородом.

- За основу бралась базовая модель Якушевич Л.В. и в нее вносились коррективы с учетом рассчитанных параметров потенциальной энергии разрыва связи. Уравнения в модели нелинейные, решались методом Рунге – Кутты 4-го порядка.

- Да, уравнения для первой цепочки кратко представлены на слайде.

- Да, она была выведена Якушевич Л.В. Это ее модель, она общепринятая и используется. Мы с ней связывались и консультировались.

На заседании 29 июня 2026 года диссертационный совет принял решение за исследование водородных связей в двухцепочечных макромолекулах при моделировании воздействия внешнего крутящего момента и модификации

изотопного состава среды, выполненное в области физики конденсированного состояния, заключающееся в получении новых научно обоснованных результатов о зависимости количества разрывов от числа тринуклеотидных повторов, влиянии локализации замены гуанина на аденин и эффекте единичных изотопных D/H замен, имеющих существенное значение для развития фундаментальной науки и практики прогнозирования стабильности двухцепочечной макромолекулы, присудить Лясота Оксане Михайловне ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 15, против присуждения учёной степени – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета 24.2.320.03  
д.ф.-м.н., академик РАН

Бабешко  
Владимир Андреевич

Ученый секретарь  
диссертационного совета 24.2.320.03  
д.ф.-м.н., доцент

Зарецкая  
Марина Валерьевна



29 июня 2026 г.