

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

**Кручинина Никиты Юрьевича**

на тему: «**Формирование структуры и конформационная динамика полимерных цепей на поверхности адсорбентов, включая поверхности нанотел**»,

представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

по специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния

В диссертации Н. Ю. Кручинина, проводится исследование конформационной структуры макромолекулярных цепей, адсорбированных на поверхности нанобъектов различной формы с использованием метода молекулярной динамики.

**Актуальность работы.** Прогресс в микроэлектронике приводит все к большей миниатюризации вплотную приблизившись к единицам нанометров. Перспективными материалами для использования являются гибридные наносистемы с адсорбированными на поверхности наночастиц полимерными молекулами, которые могут применяться для создания химических сенсоров и базовых элементов для устройств нанoeлектроники, а также в биохимических и биомедицинских исследованиях. В связи с этим актуальной задачей является создание таких наносистем, свойствами которых можно управлять как посредством воздействия электромагнитным излучением, так и статическим электрическим полем. Это можно осуществить, если на поверхности металлической наночастицы адсорбирована полиэлектролитная макроцепь. Изменяя поверхностную плотность заряда на поверхности наночастицы воздействием внешнего электрического поля, возможно управлять изменением конформаций адсорбированного полиэлектролита и, соответственно, формой макромолекулярной опушки на поверхности наночастицы. В случае, если с макроцепью связаны малые фотоактивные молекулы или атомарные кластеры небольшого размера, то их расположение относительно поверхности адсорбента также будет изменяться при перестройке конформационной структуры макромолекулы. Этот эффект можно использовать, например, для создания химических сенсоров.

**Научная новизна работы** заключается в исследовании характера конформационных изменений адсорбированных макроцепей на поверхности адсорбентов различной формы, в том числе, на заряженных поверхностях металла. Были исследованы конформационные изменения полиэлектролитов на поверхности металлических наночастиц поляризованных во внешнем однородном электрическом поле и во внешнем переменном электрическом



поле. Получены характерные распределения плотности атомов адсорбированных макроцепей с разной последовательностью заряженных звеньев. Также исследованы конформационные изменения полиэлектролитных макромолекул поверхности цилиндрического нанопровода при вращении вокруг оси вектора поляризующего электрического поля.

**Научная и практическая значимость работы.** Исследованные гибридные наноструктуры могут рассматриваться как чувствительные элементы некоторых устройств формирующейся измерительной наноэлектроники, в том числе с управляемой внешним электрическим полем анизотропией. Результаты работы могут найти применение при решении проблем создания люминесцентно-оптического измерителя концентрации молекулярного кислорода в качестве датчика-модуля технологического процесса и сенсора синглетного кислорода для биомедицинских применений, а также при создании гибридных наносистем с адсорбированными на наночастице полимерной цепью с фотоактивными молекулами – центрами генерации в качестве сенсibilизаторов в фотодинамической терапии для генерации синглетного кислорода.

Результаты диссертационного исследования представлены на 28 научных международных и Всероссийских конференциях. По теме диссертации опубликовано 32 статьи, из них 26 в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах Web of Science и Scopus. Исследования в диссертации Кручинина Н.Ю. подробно описаны лаконичным научным языком.

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения и списка используемых источников.

Во введении обоснована актуальность исследования, сформулированы цели и задачи, научная новизна, выносимые на защиту положения, научная и практическая значимость работы.

В первой главе представлен литературный обзор по тематике исследования, включающий в себя метод молекулярной динамики, статистический подход описания конформационной структуры макромолекул на адсорбирующей поверхности, а также описание кинетики диффузионно-контролируемых бимолекулярных фотореакций в приповерхностном слое наночастицы с адсорбированной макромолекулой.

Во второй главе представлены результаты исследования конформационной структуры макроцепей на плоской поверхности адсорбента, включая молекулярно-динамическое моделирование полиамфолитов на заряженной поверхности металла.

В третьей главе рассмотрены конформационные изменения макроцепей на поверхности сферической наночастицы, включая исследование электрически индуцированных конформационных изменений полиамфолитов и однородно заряженных макроцепей на поверхности



заряженной и поляризованной сферической наночастицы. Приведено описание математической модели перестройки конформаций гауссовой цепи, адсорбированной на поляризованной наночастице.

В четвертой главе исследованы конформационные изменения адсорбированных макроцепей на поверхности цилиндрического нанообъекта, включая исследование перестройки конформационной структуры полипептидов на поверхности однородно заряженного и поляризованного нанопровода. Также рассмотрена математическая модель формирования макромолекулярной опушки на поверхности цилиндрического нанопровода.

В пятой главе рассмотрены электрически индуцированные изменения конформационной структуры полиэлектролитов на поверхности заряженного или поляризованного наносфероида вытянутой и сплюснутой формы, включая исследование изменений конформационной структуры однородных полипептидов на поверхности поляризованного вытянутого металлического наносфероида при изменении водородного показателя. Представлена математическая модель конформаций полиэлектролитов на поверхности металлического наносфероида.

В шестой главе была исследована перестройка конформаций макроцепей на поверхности в целом нейтральных металлических нанообъектов сферической, цилиндрической и сфероидальной формы в переменном электрическом поле, включая исследование конформационных изменений макромолекулярных цепей на поверхности металлического нанопровода во вращающемся электрическом поле.

В седьмой главе рассмотрены конформационные изменения однородно заряженных полиэлектролитов на поверхности противоположно заряженных металлических наночастиц сферической, вытянутой и сплюснутой сфероидальной формы в переменном электрическом поле.

В целом диссертация Кручинина Н.Ю. производит самое благоприятное впечатление. В первую очередь благодаря своей целостности, подробности, строгости изложения и умения доходчиво объяснять получаемые результаты.

По диссертации можно сделать следующие замечания, большая часть из которых носит характер пожеланий, что, однако, не снижает общей высокой оценки результатов диссертации:

1. В первой главе стоило бы помимо описания используемых для расчетов методов привести описание современного состояния экспериментальных и теоретических работ по исследованию свойств макромолекул на поверхности золота.
2. В главе 6 приводятся результаты, полученные молекулярной динамикой для двух разных температур 300К и 900К. В тексте диссертации не обсуждается, как эта температура соотносится с температурой в реальном эксперименте или это всего лишь параметр моделирования?

3. Результаты диссертации носят чисто предсказательный характер. Для верификации результатов моделирования, стоило бы провести сравнение с экспериментом и обсудить его в тексте диссертации.

Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно п. 3.1 этого Положения.

Таким образом, соискатель Кручинин Никита Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

Доцент, доктор физико-математических наук,

01.04.07 — Физика конденсированного состояния,

профессор кафедры общей физики физического факультета

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1.

Тел.: +7 (495) 939 45 90

e-mail: [klavsyuk@physics.msu.ru](mailto:klavsyuk@physics.msu.ru)

« 07 » \_\_\_\_\_ 12 \_\_\_\_\_ 2023 г.

Клавсюк Андрей Леонидович

Подпись А.Л. Клавсюка удостоверяю:

И.о. декана физического факультета

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,

доктор физико-математических наук

В.В. Белокуров