

Заключение диссертационного совета МГУ.013.3  
по диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Решение диссертационного совета от «21» декабря 2023 г. № 20

О присуждении Кручинину Никите Юрьевичу, гражданину Российской Федерации,  
ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Формирование структуры и конформационная динамика полимерных цепей на поверхности адсорбентов, включая поверхности нанотел» по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния принята к защите диссертационным советом МГУ.013.3 «21» сентября 2023 г., протокол № 14.

Соискатель Кручинин Никита Юрьевич, 1980 года рождения, диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Исследование структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах» защитил в 2012 году в диссертационном совете Д 501.002.01 при Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова.

Соискатель работает доцентом на кафедре радиофизики и электроники физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет».

Диссертация выполнена на кафедре радиофизики и электроники физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет».

Научный консультант: Кучеренко Михаил Геннадьевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и электроники физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет».

Официальные оппоненты:

Шайтан Константин Вольдемарович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры биоинженерии биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»,

Крупянский Юрий Федорович, доктор физико-математических наук, руководитель Отдела строения вещества Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н.Семенова Российской академии наук»,

Клавсюк Андрей Леонидович, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры общей физики физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова».

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 77 опубликованных работ, из них 32 работы по теме диссертации, в

том числе 27 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях и изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния. Все статьи индексируются в базах данных Web of Science, Scopus и RSCI.

Перечень основных публикаций:

Статьи в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности:

1. Кручинин Н.Ю. Кинетика фотореакций в регулярной пористой наноструктуре с цилиндрическими ячейками, заполненными активаторсодержащими макромолекулами / Кучеренко М.Г., Русинов А.П., Чмерева Т.М., Игнат'ев А.А., Кислов Д.А., Кручинин Н.Ю. // Оптика и спектроскопия. – 2009. – Т. 107, № 3. – С. 510-516.

Kruchinin N.Yu. Kinetics of photoreactions in a regular porous nanostructure with cylindrical cells filled with activator-containing macromolecules / Kucherenko M.G., Rusinov A.P., Chmereva T.M., Ignat'ev A.A., Kislov D.A., Kruchinin N.Yu. // Optics and Spectroscopy. – 2009. – V. 107, no. 3. – P. 480-485. IF=0.6 (WoS). (Вклад автора 0.17)

2. Kruchinin N.Yu. Change in the Kinetics of Delayed Annihilation Fluorescence During Rearrangement of Polymer-Chain Structure in a Nanocavity of a Solid Adsorbent / Kucherenko M.G., Izmodenova S.V., Kruchinin N.Yu., Chmereva T.M. // High Energy Chemistry. – 2009. – V. 43, no. 7. – P. 592–598. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.25)

3. Кручинин Н.Ю. Межмолекулярный безызлучательный перенос энергии в кластерах с плазмонными наночастицами / Кучеренко М.Г., Степанов В.Н., Кручинин Н.Ю. // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 118, № 1. – С. 86-93.

Kruchinin N.Yu. Intermolecular nonradiative energy transfer in clusters with plasmonic nanoparticles / Kucherenko M.G., Stepanov V.N., Kruchinin N.Yu. // Optics and Spectroscopy. – 2015. – V. 118, no. 1. – P. 103–110. IF=0.6 (WoS). (Вклад автора 0.3)

4. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование электрически индуцированных конформационных изменений полиамфолитных полипептидов на поверхности золотой наночастицы / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоидный журнал. – 2019. – Т. 81, № 2. – С. 175-184.

Kruchinin N.Yu. Molecular dynamics simulation of electrically induced conformational changes of polyampholytic polypeptides on gold nanoparticle surface / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Colloid Journal. – 2019. – V. 81, no. 2. – P. 110-119. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.8)

5. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование перестройки конформационной структуры полиамфолитных макромолекул на поверхности поляризованной металлической наночастицы / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоидный журнал. – 2020. – Т. 82, № 2. – С. 177-185.

Kruchinin N.Yu. Molecular-dynamics simulation of rearrangements in the conformational structure of polyampholytic macromolecules on the surface of a polarized metal nanoparticle /

Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // *Colloid Journal*. – 2020. – V. 82, no. 2. – P. 136-143. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.7)

6. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование связанных с атомарными кластерами полиамфолитных полипептидов на поверхностях металлоподобных нанообъектов / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // *Биофизика*. – 2020. – Т. 65, № 2. – С. 219-228.

Kruchinin N.Y. A molecular dynamics simulation of polyampholytic polypeptides associated with atomic clusters on the surfaces of metal-like nanoobjects / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // *Biophysics*. – 2020. – V. 65, no. 2. – P. 186-194. SJR=0.182 (Scopus). (Вклад автора 0.8)

7. Кручинин Н.Ю. Электрически индуцированные конформационные изменения связанных с кластером золота полиамфолитных полипептидов на золотой поверхности: молекулярно-динамическое моделирование / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // *Журнал физической химии*. – 2020. – Т. 94, № 7. – С. 1066-1072.

Kruchinin N.Yu. Electrically induced conformational changes in gold cluster-bonded polyampholytic polypeptides on a surface of gold: molecular dynamic simulation / Kruchinin N.Y., Kucherenko M.G. // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. – 2020. – V. 94, no. 7. – P. 1433-1438. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.9)

8. Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения полиамфолитных полипептидов на поверхности металлической наночастицы в сверхвысококачественном электрическом поле: молекулярно-динамическое моделирование / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // *Коллоидный журнал*. – 2020. – Т. 82, № 4. – С. 440-450.

Kruchinin N.Yu. Conformational rearrangements of polyampholytic polypeptides on metal nanoparticle surface in microwave electric field: molecular-dynamics simulation / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // *Colloid Journal*. – 2020. – V. 82, no. 4. – P. 392-402. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.8)

9. Кручинин Н.Ю. Плазменная активация и тушение люминесценции растворов полифениленвинилена (МЭН-PPV) одно- и двустенными углеродными нанотрубками / Кучеренко М.Г., Степанов В.Н., Кручинин Н.Ю. // *Оптика и спектроскопия*. – 2020. – Т. 128, № 8. – С. 1203-1215.

Kruchinin N.Yu. Plasmon activation and luminescence quenching of solutions of polyphenylene vinylene (МЭН-PPV) by single-walled and double-walled carbon nanotubes / Kucherenko M.G., Stepanov V.N., Kruchinin N.Yu. // *Optics and Spectroscopy*. – 2020. – V. 128, no. 8. – P. 1298-1310. IF=0.6 (WoS). (Вклад автора 0.3)

10. Кручинин Н.Ю. Перестройка конформационной структуры полипептидов на поверхности металлического нанопровода во вращающемся электрическом поле: молекулярно-динамическое моделирование / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // *Коллоидный журнал*. – 2021. – Т. 83, № 1. – С. 57-65.

Kruchinin N.Yu. Rearrangements in the conformational structure of polypeptides on the surface of a metal nanowire in rotating electric field: molecular dynamics simulation / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // *Colloid Journal*. – 2021. – V. 83, no. 1. – P. 79-87. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.8)

11. Kruchinin N.Yu. Rearrangement of the conformational structure of polyampholytes on the surface of a metal nanowire in a transverse microwave electric field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Eurasian Physical Technical Journal. – 2021. – V. 18, no. 1. – P. 16-28. SJR=0.231 (Scopus). (Вклад автора 0.7)

12. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование однородно заряженных полипептидов на поверхности заряженной металлической наночастицы в переменном электрическом поле / Кручинин Н.Ю. // Коллоидный журнал. – 2021. – Т. 83, № 3. – С. 302-310.

Kruchinin N.Yu. Molecular dynamics simulation of uniformly charged polypeptides on the surface of a charged metal nanoparticle in an alternating electric field / Kruchinin N.Yu. // Colloid Journal. – 2021. – V. 83, no. 3. – P. 326-334. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 1.0)

13. Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения однородно заряженных цепей полиэлектролитов на поверхности поляризованной золотой наночастицы: молекулярно-динамическое моделирование и теория гауссовой цепи в поле / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г., Неясов П.П. // Журнал физической химии. – 2021. – Т. 95, № 2. – С. 262-271.

Kruchinin N.Yu. Conformational changes of uniformly charged polyelectrolyte chains on the surface of a polarized gold nanoparticle: molecular dynamics simulation and the theory of a gaussian chain in a field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G., Neyasov P.P. // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2021. – V. 95, no. 2. – P. 362-371. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.5)

14. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование конформационных изменений макромолекул полиэлектролитов на поверхности заряженной или поляризованной вытянутой сфероидальной металлической наночастицы / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоидный журнал. – 2021. – Т. 83, № 5. – С. 557-571.

Kruchinin N.Yu. Molecular dynamics simulation of conformational rearrangements in polyelectrolyte macromolecules on the surface of a charged or polarized prolate spheroidal metal nanoparticle / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Colloid Journal. – 2021. – V. 83, no. 5. – P. 591-604. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.7)

15. Кручинин Н.Ю. Моделирование перестройки конформационной структуры полиамфолитов на поверхности вытянутой сфероидальной металлической наночастицы в переменном электрическом поле / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Химия высоких энергий. – 2021. – Т. 55, № 6. – С. 423-435.

Kruchinin N.Yu. Modeling the conformational rearrangement of polyampholytes on the surface of a prolate spheroidal metal nanoparticle in alternating electric field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // High Energy Chemistry. – 2021. – V. 55, no. 6. – P. 442-453. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.7)

16. Kruchinin N.Yu. Rearrangements in the conformational structure of polyampholytic polypeptides on the surface of a uniformly charged and polarized nanowire: molecular dynamics simulation / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Surfaces and Interfaces. – 2021. – V. 27. – P. 101517. IF=6.2 (WoS). (Вклад автора 0.9)

17. Кручинин Н.Ю. Статистическое и молекулярно-динамическое моделирование электрически индуцированных изменений конформационной структуры полиамфолитов на поверхности сплюснутого металлического наносфероида / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г.

// Коллоидный журнал. – 2022. – Т. 84, № 2. – С. 171-185.

Kruchinin N.Yu. Statistical and molecular-dynamics simulation of electrically induced changes in the conformational structure of polyampholytes on the surface of a flattened metal nanospheroid / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Colloid Journal. – 2022. – V. 84, no. 2. – P. 169–182. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.7)

18. Кручинин Н.Ю. Конформации однородных полипептидов на поверхности поляризованного вытянутого металлического наносфероида при изменении водородного показателя: молекулярно-динамическое моделирование / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Журнал физической химии. – 2022. – Т. 96, № 3. – С. 416-425.

Kruchinin N.Yu. Molecular dynamics simulation of the conformational structure of uniform polypeptides on the surface of a polarized metal prolate nanospheroid with varying pH / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2022. – V. 96, no. 3. – P. 624-632. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.8)

19. Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения макромолекул полиэлектролитов на поверхности заряженного металлического вытянутого наносфероида в переменном электрическом поле / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Высокомолекулярные соединения. Серия А. – 2022. – Т. 64, № 3. – С. 223-238.

Kruchinin N.Yu. Conformational changes of polyelectrolyte macromolecules on the surface of charged prolate metal nanospheroid in alternating electric field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Polymer Science Series A. – 2022. – V. 64, no. 3. – P. 240–254. IF=1.0 (WoS). (Вклад автора 0.7)

20. Kruchinin N.Yu. Modeling of electrical induced conformational changes of macromolecules on the surface of metallic nanospheroids / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Materials Today: Proceedings. – 2022. – V. 71, Part 1. – P. 18-30. SJR=0.445 (Scopus). (Вклад автора 0.8)

21. Kruchinin N.Yu. Modeling of conformational changes of polyelectrolytes on the surface of a transversely polarized metal nanowire in an external electric field / Kucherenko M.G., Kruchinin N.Yu., Neyasov P.P. // Eurasian Physical Technical Journal. – 2022. – V. 19, no. 2. – P. 19-29. SJR=0.231 (Scopus). (Вклад автора 0.5)

22. Кручинин Н.Ю. Моделирование конформационных изменений однородно заряженных полиэлектролитов на поверхности поляризованного сплюснутого металлического наносфероида / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г., Неясов П.П. // Журнал физической химии. – 2022. – Т. 96, № 12. – С. 1785-1796.

Kruchinin N.Yu. Modeling Conformational Changes in Uniformly Charged Polyelectrolytes on the Surface of a Polarized Metallic Oblate Nanospheroid / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G., Neyasov P.P. // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2022. – V. 96, no. 12. – P. 2718-2728. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.5)

23. Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения полиамфолитных макроцепей на поверхности сплюснутого металлического наносфероида в переменном электрическом поле / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Химия высоких энергий. – 2022. – Т. 56, № 6. – С. 485-496.

Kruchinin N.Yu. Conformational changes in polyampholyte macrochains on the surface of an oblate metallic nanospheroid in alternating electric field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // High Energy Chemistry. – 2022. – V. 56, no. 6. – P. 499-510. IF=0.7 (WoS). (Вклад автора 0.8)

24. Кручинин Н.Ю. Перестройка конформационной структуры полиэлектролитов на поверхности сплюснутой сфероидальной металлической наночастицы в переменном электрическом поле / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоидный журнал. – 2023. – Т. 85, № 1. – С. 47-62.

Kruchinin N.Yu. Rearrangements in the conformational structure of polyelectrolytes on the surface of a flattened metal nanospheroid in an alternating electric field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Colloid Journal. – 2023. – V. 85, no. 1. – P. 44-58. IF=1.1 (WoS). (Вклад автора 0.75)

25. Кручинин Н.Ю. Моделирование конформационных перестроек адсорбированной на металлической наночастице макромолекулы во внешнем электрическом поле / Кучеренко М.Г., Неясов П.П., Кручинин Н.Ю. // Химическая физика. – 2023. – Т. 42, № 5. – С. 51-60.

Kruchinin N.Yu. Modeling conformational rearrangements of a macromolecule adsorbed on a metal nanoparticle in an external electric field / Kucherenko M.G., Neyasov P.P., Kruchinin N.Yu. // Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2023. – V. 17, no. 3. – P. 745-754. IF=1.4 (WoS). (Вклад автора 0.4)

26. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование конформационной структуры полиамфолитных полипептидов на поверхности заряженной сферической золотой наночастицы во внешнем электрическом поле / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Высокомолекулярные соединения. Серия А. – 2023. – Т. 65, № 2. – С. 150-160.

Kruchinin N.Yu. Molecular dynamics simulation of the conformational structure of polyampholyte polypeptides at the surface of a charged gold nanoparticle in external electric field / Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. // Polymer Science Series A. – 2023. – V. 65, no. 2. – P. 224-233. IF=1.0 (WoS). (Вклад автора 0.9)

27. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование адсорбции полипептидов с фотоактивными молекулами поверхностью углеродной нанотрубки / Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Химическая физика и мезоскопия. – 2016. – Т. 18, № 2. – С. 225-238. IF=0.32 (РИНЦ). (Вклад автора 0.6)

На диссертацию и автореферат поступило 6 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их профессиональной квалификацией и наличием публикаций в области физики конденсированного состояния, физики макромолекул.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований получены научные результаты и решены важные научные проблемы, имеющие большое значение для развития физики гибридных наноструктур с адсорбированными на поверхности нанотел макроцепями.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

- Адсорбированная на нейтральной поверхности нанобъекта макромолекулярная цепь имеет характерное распределение концентрации звеньев, которое зависит от длины звена полимера, параметров потенциала поверхности и ее кривизны.
- Кривые радиальных распределений концентрации атомов малых молекул красителей, находящихся в структуре полиамфолита, схожи с кривыми распределений звеньев макроцепи. Связанные с макроцепью небольшие атомарные кластеры смещаются относительно адсорбирующей поверхности вслед за электрически индуцированными конформационными изменениями полиамфолитной макромолекулы.
- На однородно заряженной металлической поверхности (плоскость, сферическая наночастица и цилиндрический нанопровод) формируется полиамфолитная опушка, состоящая из трех слоев: двух разноименно заряженных и расположенного между ними нейтрального слоя.
- На поверхности поляризованной во внешнем однородном электрическом поле сферической наночастицы или поперечно поляризованного нанопровода полиамфолитная опушка вытягивается в направлении поляризации. На поверхности поляризованного вдоль большой оси вытянутого металлического наносфероида образуется гантелеобразная полиамфолитная опушка. На поверхности сплюснутого наносфероида, поляризованного вдоль оси вращения, полиамфолитная опушка набухает как в его приполярных областях, так и в его экваториальной области.
- На поверхности поляризованных во внешнем однородном электрическом поле нанобъектов различной формы происходит смещение звеньев однородно заряженной макроцепи в противоположно заряженную приполярную область. Чем больше значение водородного показателя отличается от значения изоэлектрической точки однородного полипептида, тем сильнее происходит смещение макроцепи к острию поляризованного вдоль большой оси вытянутого наносфероида.
- На поверхности заряженной сферической золотой наночастицы, которая при этом поляризована во внешнем однородном электрическом поле, образуется несимметричная относительно экватора полиамфолитная опушка в тех случаях, когда поверхностные заряды заряженной наночастицы в одной из приполярных областей скомпенсированы зарядами, индуцированными на наночастице внешним электрическим полем.
- На поверхности в целом нейтральных сферической и сфероидальных металлических наночастиц при периодическом изменении направления их поляризации образуется опоясывающая полиамфолитная опушка в экваториальной области, ширина которой на поверхности вытянутого наносфероида зависит от амплитуды внешнего поляризуемого переменного электрического поля, а поверхности сплюснутого наносфероида образовавшееся полиамфолитное кольцо набухает при увеличении амплитуды внешнего переменного электрического поля. Также форма макромолекулярной опушки может

изменяться от плотно обволакивающей к вытянутой или гантелеобразной дважды за период колебаний.

- Во вращающемся вокруг оси металлического нанопровода электрическом поле наблюдается вращение в том же направлении вокруг нанопровода адсорбированных на поверхности однородно заряженных полипептидов, а также полиамфолитных полипептидов, у которых расстояние между положительно и отрицательно заряженными звеньями в макроцепи больше половины длины окружности нанопровода.
- На поверхности заряженной металлической наночастицы, направление поляризации которой изменялось с частотой, соответствующей сверхвысокочастотному электрическому полю, в экваториальной области формируется опоясывающая опушка из звеньев противоположно заряженных полиэлектролитов. При этом плотность опушки зависит как от величины заряда наночастицы, так и от доли заряженных звеньев в полиэлектролите. Если наночастица была в форме вытянутого сфероида, то ширина полиэлектролитной опушки зависит еще и от амплитуды внешнего переменного электрического поля.

На заседании 21.12.2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Кручинину Никите Юрьевичу ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 4 доктора наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 14, «против» – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета МГУ.013.3  
доктор физико-математических наук,  
профессор, академик РАН

А.Р. Хохлов

Ученый секретарь  
диссертационного совета МГУ.013.3  
кандидат физико-математических наук, доцент

И.А. Малышкина

21 декабря 2023 г.