

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Щугоревой Ирины Андреевны  
«Моделирование структуры и свойств синтетических олигомеров методами  
теории функционала плотности», представленную на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа И.А. Щугоревой посвящена теоретическому моделированию структуры и физических свойств синтетических олигомеров на основе флуорена и ДНК-нуклеотидов (аптамеров). Данные соединения являются перспективными материалами для создания биосенсоров, поскольку ДНК-аптамеры способны распознавать самые разнообразные мишени с высокой аффинностью и специфичностью, путём образования уникальной трёхмерной структуры, а сопряженные полимеры демонстрируют усиление сенсорного сигнала, по сравнению с их низкомолекулярными аналогами. При этом их структуру можно модифицировать для регулировки растворимости и длин волн поглощения/испускания.

Перед соискателем стояла задача по моделированию пространственной структуры пяти различных коротких синтетических олигонуклеотидов на основе данных малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР), а также установление влияния заместителей в основной и боковой цепи на оптические свойства олигомеров флуорена с помощью методов функционала плотности и молекулярнодинамических методов. Работа носит междисциплинарный характер, на протяжении всего исследования происходило обсуждение результатов со специалистами в области теоретической физики, оптики, материаловедения, биологии и медицины.

В диссертационной работе Ирины Андреевны, представлены оригинальные результаты, которые сформулированы в виде пяти защищаемых положений. Полученные данные имеют теоретическую и практическую значимость, в частности они позволят оптимизировать структуры синтетических олигомеров с целью получения необходимых свойств, что в дальнейшем будет способствовать целенаправленному синтезу и позволит создавать эффективные светоизлучающие устройства, био- и хемосенсоры на их основе.

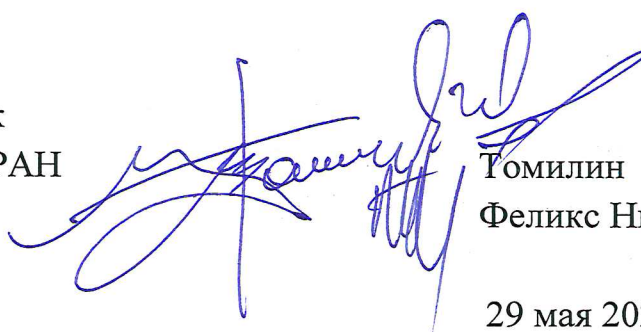
Результаты проведённых теоретических расчётов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными, что подтверждает адекватность применяемых методов и подходов. Основные результаты работы представлены на различных конференциях международного уровня и представлены в ведущих рецензируемых журналах. По материалам диссертации опубликовано

пять научных работ в изданиях индексируемых в Web of Science и Scopus и рекомендованных ВАК, а также получен один патент.

За время работы над диссертацией И.А. Щугорева показала себя квалифицированным и целеустремленным специалистом, работающим на стыке наук, способным решать поставленные задачи.

Считаю, что работа «Моделирование структуры и свойств синтетических олигомеров методами теории функционала плотности» полностью соответствует требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор И.А. Щугорева заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Научный руководитель:  
Старший научный сотрудник  
Лаборатории ФМЯ, ИФ СО РАН  
Кандидат химических наук,



Томилин  
Феликс Николаевич

29 мая 2023 г.

Подпись <u>Томилин Ф.Н.</u> заверяю
Ученый секретарь <u>К.Ф. М.П.</u>
Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)
« <u>29</u> » <u>05</u> 20 <u>23</u> г.

