

## ОТЗЫВ

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

**Актуальность.** В настоящее время активно расширяется применение физических методов для изучения биологических объектов, в том числе и для медицинских применений. Благодаря росту компьютерных мощностей и развитию теоретических методов, атомистическое моделирование становится одним из неотъемлемых этапов комплексных междисциплинарных исследований, особенно в области изучения структурных характеристик. Представленная диссертационная работа демонстрирует успешное применение теоретических методов из области физики конденсированного состояния для изучения структуры и физических свойств синтетических олигомеров, которые могут применяться для создания биосенсоров, что определяет ее актуальность для широкого круга приложений в материаловедении, биофизике, медицине и других областях науки и техники.

**Научная практическая значимость.** Полученные в ходе исследования результаты свидетельствуют от перспективности создания чувствительных тест-систем на базе исследованных соединений с гибко настраиваемыми и прогнозируемыми свойствами, что свидетельствует о высокой актуальности и практической значимости данной работы. Эффективность применения компьютерного моделирования наиболее ярко видно по результатам укорачивания нуклеотидной последовательности аптамера Gli-55. Полученная тридцати пяти нуклеотидная версия аптамера сохранила не только пространственную форму и связывающие свойства с клетками глиобластомы головного мозга, но и повысила специфичность.

Из **новых научных** результатов я бы выделил следующие:

- Показана возможность управления оптическими свойствами производных флуорена путем добавления заместителей в основную цепь.
- Систематические исследования пространственной структуры ДНК-аптамеров.

**Достоверность** результатов работы подтверждается использованием современных апробированных квантово-химических методов: DFT, TD-DFT, DFTB, методов молекулярной динамики с силовым полем Amber14sb, а также согласием полученных теоретических расчетов с данными реальных экспериментов.

**Публикации по теме диссертации** достаточно полно представлены в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах.

**Автореферат** производит положительное впечатление о проделанной исследовательской работе. Однако стоит отметить следующие замечания:

- в автореферате не указаны временные характеристики и общая продолжительность расчета молекулярной динамики аптамеров.

- не указаны версии программ GAMESS, GROMACS и CRY SOL, в которых проводились расчеты.

Отмеченные замечания не снижают общее впечатление от работы. Автореферат и приведенный список публикаций и патентов дают достаточно полное представление о материале диссертации. Работа полностью удовлетворяет требованиям ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор Щугорева Ирина Андреевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук  
по специальности 01.04.05 - оптика, доцент,  
заведующий кафедрой оптики и спектроскопии  
Физического факультета  
Федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»  
Черепанов Виктор Николаевич

Адрес места работы:  
634050, г. Томск, пл. Новособорная 1, офис 226,  
Томский государственный университет,  
Физический факультет  
Телефон: +7 (3822) 529-651,  
E-mail: vnch@phys.tsu.ru

Дата: 07.08.2023г.

