

## 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

Работа Щугоревой Ирины Андреевны посвящена изучению структуры и физических свойств двух различных синтетических олигомеров, а именно сополифлуоренов и аптамеров. Актуальность исследования данных объектов не вызывает сомнения, поскольку сополифлуорены являются многообещающими соединениями для создания оптоэлектронных устройств, а аптамеры выступают в качестве перспективной замены антител, поскольку способны распознавать с высокой селективностью и специфичностью различные биологические мишени. Диссертантом было отмечено, что на основе данных соединений можно создать эффективные биосенсоры для диагностики различных заболеваний, что придает работе не только целостный вид, но и подчеркивает перспективность практического применения полученных результатов.

Для исследования таких сложных объектов были использованы современные квантовохимические и молекулярнодинамические методы, а полученные результаты были верифицированы с помощью различных экспериментальных данных. Таким образом в диссертационной работе было показано, что оптическим поглощением сополифлуорена можно управлять путем варьирования количества последовательных звеньев бензотиазола в основной цепи, в то время как длина алкильных заместителей в боковой цепи не влияет на пик поглощения. Также определены атомные конформации ряда ДНК-аптамеров в реальном растворе с помощью комбинированного подхода, включающего молекулярное моделирование и малоугловое рентгеновское рассеяние. Стоит отметить результат, касающийся модификации аптамера Gli-55, в котором благодаря восстановленной структуре удалось сократить длину нуклеотидной последовательности и при этом сохранить связывающие свойства с опухолевыми клетками.

Достоверность полученных в работе результатов подтверждается рядом публикаций в рецензируемых научных журналах, индексируемых в российских и международных базах данных, таких как РИНЦ, Web of Science и Scopus. Кроме этого, диссертантом был получен один патент.

Следует отметить некоторые замечания по автореферату:

- В работе отсутствуют расчеты оптических спектров олигомеров сополифлуоренов с числом последовательно стоящих звеньев бензотиазола более двух. При этом исследование такой зависимости представляет интерес для понимания пределов, в которых можно варьировать положение пиков оптического поглощения.
- Подписи на некоторых рисунках и графиках выполнены очень мелким шрифтом (рис. 3, 8, 9).

- Полученные результаты представляют большую практическую важность не только в области физики и химии, но и медицины, биологии. Тем не менее, в автореферате не уделено должного внимания перспективам их практического применения.
- Результаты исследований опубликованы в высокорейтинговых научных изданиях, результаты выполнены на высоком уровне. Однако, у диссертанта отсутствуют публикации с первым авторством.
- Положения, выносимые на защиту, сформулированы, на мой взгляд, скорее как выводы. Например, положение №1 сильнее бы звучало в следующей формулировке: «Закономерности батохромного сдвига спектра поглощения в основной цепи сополифлуорена при наличие двух соседних звеньев бензотиазола.»

Тем не менее, считаю, что приведенные замечания никак не снижают научную и практическую значимость полученных результатов, а относятся к стилистике и личным предпочтениям автора.

В целом, автореферат позволяет сделать вывод о том, что диссертация Щугоревой Ирины Андреевны на тему «Моделирование структуры и свойств синтетических олигомеров методами теории функционала плотности» выполнена на высоком уровне и удовлетворяет всем критериям, установленным в Положении о присуждении ученых степеней ВАК, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник, доцент  
 Заведующий Центром компьютерного моделирования  
 неорганических и композитных наноразмерных  
 материалов  
 д.ф.-м.н. (01.04.07 – Физика конденсированного  
 состояния)  
 Квашнин Дмитрий Геннадьевич

04 сентября 2023



119334 Москва, ул. Косыгина, 4  
 Тел.: +7(916) 236-75-35  
 Адрес электронной почты: [dgkvashnin@phystech.edu](mailto:dgkvashnin@phystech.edu)

Подпись Квашнина Д.Г. заверяю

(Фамилия И.О.)

Ученый секретарь  
 ИБХФ РАН, к.б.н.

(должность)



(подпись)

Скалацкая С.И.

(И.О. Фамилия)