

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертационной работе Рошаль Дарьи Сергеевны **«Релаксационные процессы и самоорганизация на поверхности неплоских двумерных микро- и нанообъектов»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.15 – физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика

Диссертационная работа Рошаль Дарьи Сергеевны посвящена **актуальной** теме – изучению и моделированию релаксационных процессов на поверхности неплоских двумерных микро- и нанообъектов. В работе рассмотрены структурные, морфологические и механические свойства микро- и наноматериалов и композитных структур на их основе. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, в ней от начала и до конца прослеживается индивидуальный почерк автора, который проявляется в сочетании тополого-геометрического анализа исследуемых структур с методами тщательного компьютерного моделирования Монте-Карло и последующего количественного и качественного анализа полученных результатов.

Не могу сказать, что я регулярно читаю кандидатские диссертации, но, тем не менее, имею некоторую статистику, основанную на опыте оппонирования работ, представляемых к защите как в России, так и за рубежом. Работа Дарьи Сергеевны Рошаль, с моей точки зрения, соответствует, в среднем, не одной, а, по меньшей мере, двум кандидатским диссертациям по количеству полученных результатов и качеству публикаций. Также, вызывает удивление, что автор-физик прекрасно ориентируется как в структурных особенностях исследуемых химических соединений, так и в принципах их биологического функционирования. Такой комплексный и междисциплинарный подход к рассматриваемой проблеме – большая редкость не только для кандидатских диссертаций, но и для докторских. Качество работы Д.С. Рошаль также подтверждается публикациями в ведущих

научных журналах (в том числе, входящих в группу «Nature»): 8 полноценных статей – это очень много для кандидатской диссертации.

Должен сказать, что для меня чтение диссертации Д.С. Ропаль оказалось увлекательным занятием, поскольку проблемы оптимальной упаковки взаимодействующих частиц на подложке с кривизной и внутренней структурой, и возникающие в связи с этим вопросы влияния соизмеримости на геометрию состояния системы с наименьшей энергией, оказались очень близки интересующим нас вопросам возникновения устойчивых конфигураций отталкивающихся частиц на цилиндрах конечного размера, в которых естественным образом возникает модулярная геометрия.

Работа состоит из введения и главы 1, в которых сформулированы задачи, рассматриваемые в последующих главах и дан достаточно подробный обзор современного состояния исследований, касающихся проблемы Томсона – основного стержня работы; а также, трех основных глав 2-4, каждая из которых посвящена конкретной практической проблеме, связанной с оптимальной упаковкой частиц на сфере или цилиндре. По словам автора, общая проблема, рассмотренная в диссертации, заключается: (а) в исследовании вопроса как именно плоский гексагональный порядок подстраивается под сферическую топологию, и (б) в применении полученных теоретических результатов к сферическим коллоидным кристаллам и сферическим эпителиальным монослоям.

В главе 1 формулируется проблема Томсона – оптимального (по энергии) размещения ансамбля непроницаемых взаимодействующих частиц на сфере конечного радиуса и возникновения дефектов упаковки при добавлении/удалении частиц. В данной главе сформулированы принципы и даны примеры топологического анализа возникающих упаковок и дефектов структуры (рубцы, складки, дислокации и дисклинации). Здесь же обсуждаются особенности порядка, возникающего в двустенных трубчатых мембранах, а также рассматриваются

особенности многослойного гексагонального порядка и влияние соизмеримости на процессы отбора нанотрубок.

В главе 2 построена модель самосборки сферических коллоидных кристаллов (СКК). В частности, предложен метод поиска новых решений проблемы Томсона, основанный на использовании правильных и слабо деформированных разверток икосаэдра, а также показано, что рубцы (дисклинации) могут поглощать и испускать дислокации в случае сферической геометрии без сохранения дислокационного заряда (вектора Бюргерса). В данной главе также обсуждается физический механизм уменьшения степени дефектности двумерных СКК. В результате были получены 40 сферических кристаллов, обладающих энергиями, меньшими, чем известные ранее структуры с таким же самым количеством частиц.

Глава 3 посвящена проблемам соизмеримости упаковок внутреннего и внешнего слоев. В первой части главы 3 обсуждается вопрос соразмерности внутренней и внешней трубок бактериофага T4 и влияние соизмеримости на эффективность работы данной шприце-подобной наномашинки. В частности, показано, что переход системы в соизмеримое состояние повышает эффективность работы наномашинки за счет увеличения крутящего момента внутренней трубки, пронизывающей клеточную мембрану. Во второй части главы 3 рассматривается вопрос соизмеримости упаковок молекул нанотрубки и покрывающих её органических молекул. Автор показывает, что эффективность покрытия нанотрубки органическими молекулами зависит от способности молекул оборачивать нанотрубку соизмеримым образом. Данный эффект предлагается использовать для сортировки нанотрубок по структурным параметрам с использованием органических молекул и полимеров.

В главе 4 рассмотрена структура и дефектность сферических эпителиальных монослоев различных видов асцидий. Численное исследование различных видов асцидий методом градиентного спуска показывает, что финальные структуры

имеют складки, рубцы, а также неизвестные ранее нелинейные дефекты – фолликулярный сферический эпителий асцидий характеризуется гексагональным порядком со специфическими удлиненными дефектами - рубцами и складками, в которых чередуются клетки с пятью и семью соседями. Продемонстрировано, что разные виды асцидий имеют разную структуру дефектов.

По ходу чтения диссертации, у меня возникали вопросы, которые я обсуждал с Д.С. Рошаль и всегда получал исчерпывающие ответы. Некоторые **вопросы**, как обсужденные, так и возникшие в процессе написания отзыва, таковы:

1) Можно ли поставить задачу, аналогичную рассмотренной в работе в разделе 1 на поверхности постоянной отрицательной кривизны с краем (на псевдосфере). Будут ли структуры возникающих дефектов аналогичны тем, которые возникают на покрытии взаимодействующими частицами поверхности постоянной положительной кривизны (на сфере)?

2) Казалось бы, при обсуждении эффектов несоизмеримости, можно попробовать адаптировать модель Френкеля-Конторовой для, хотя бы, качественного описания эффекта (кстати, данная классическая работа, насколько я понимаю, не упоминается даже в списке литературы), или такой полуфеноменологический подход является слишком грубым для рассматриваемых систем?

3) Можно ли исследовать такую задачу: рассмотреть сферу некоторого достаточно большого радиуса, разместить на ней взаимодействующие частицы, которые образуют решетку с минимальной энергией, а потом непрерывно уменьшать радиус сферы и следить за перестройкой оптимальной решетки и возникновением дефектов? Интерес представляет исследование каскада последовательных перестроек решеток.

4) В главе 4 кажется, что финальное состояние должно зависеть от начальной конфигурации, которая выбрана как стартовая точка для градиентного спуска, т.е. система может быть неэргодичной и при понижении температуры испытывать

переход в состояние стекла. Если это так, то в каком смысле можно говорить о «типичной» структуре с минимумом энергии.

Что касается **замечаний**, то они, в основном стилистического характера – по-видимому, диссертация писалась по-русски путем перевода собственных статей диссертанта с английского языка. И еще мне кажется, что в отношении предсказания новых Томсоновских структур работа имеет, скорее, академический интерес, поскольку новые обнаруженные структуры имеют практически такую же энергию, как и известные из литературы.

Высказанные вопросы и замечания не влияют на общую высокую оценку диссертационной работы и не подвергают сомнению основные положения, выносимые на защиту.

Достоверность полученных результатов, а также обоснованность положений выносимых на защиту и сделанных в работе выводов обусловлена использованием классических, многократно апробированных методов и подходов физики наноструктур, топологии и физики конденсированного состояния. Теоретические предсказания разработанных в диссертации моделей подтверждаются экспериментальными данными, опубликованными в ведущих международных журналах.

Основные результаты работы опубликованы в авторитетных рецензируемых журналах и с успехом докладывались на российских и международных конференциях. Автореферат адекватно отображает содержание диссертации.

Заключение

Суммируя, могу сказать, что данная диссертация – незаурядное междисциплинарное исследование, выполненное на высоком научном уровне. Результаты, вошедшие в диссертацию, актуальны и перспективны, а положения, вынесенные на защиту, полно и адекватно отражают проведенные исследования. Можно заключить, что диссертация Дарьи Сергеевны Рошаль «Релаксационные

процессы и самоорганизация на поверхности неплоских двумерных микро- и нанобъектов», является завершенной научно-квалификационной работой, полностью отвечает критериям раздела 2 «Положения о присуждении ученых степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет»», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а соискатель Рошаль Дарья Сергеевна заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.15 - физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика.

01.09.2021 г.

Согласен на обработку персональных данных

Сергей Константинович Нечаев



Доктор физико-математических наук (специальность 01.04.02 – Теоретическая физика), ведущий научный сотрудник Отдела Теоретической Физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки, Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской Академии Наук,

официальный оппонент

Адрес: 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53, ФИАН

Телефон: 8(495)135-42-64

Факс: 8(499)135-78-80

Эл. почта: postmaster@lebedev.ru

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ

