

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Рошаль Дарьи Сергеевны**
«РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И САМООРГАНИЗАЦИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ
НЕПЛОСКИХ ДВУМЕРНЫХ МИКРО- И НАНОБЪЕКТОВ»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности

01.04.15 — физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика.

Развитие теории самоорганизации на поверхности неплоских двумерных микро- и нанобъектов является актуальной задачей физики конденсированного состояния, в рамках которой рассматриваются и соответствующие этим объектам модулированные и соразмерные системы. Представленная диссертационная работа Дарьи Сергеевны Рошаль посвящена решению весьма важных аспектов этой задачи. В частности, в данной работе впервые предложен метод поиска новых решений проблемы Томсона; рассмотрены различные пути релаксации позиции внедрения в сферических коллоидных кристаллах и проведена оценка их вероятности; предложен метод управления дефектностью в сферических коллоидных кристаллах, обнаружена соразмерность между внутренней и внешней трубками шприцеобразного механизма бактериофага Т4 в сжатом состоянии. В работе показано, что успешное формирование покрытия нанотрубки органическими молекулами зависит от способности молекул оборачивать нанотрубку соразмерным образом, объяснена большая топологическая дефектность эпителиальных монослоев по сравнению с коллоидными кристаллами и решениями проблемы Томсона для того же числа частиц. Впервые проведено моделирование самосборки сферических коллоидных кристаллов и релаксационных процессов в них.

Проблема упаковки N структурных единиц одного размера на сфере, именуемая проблемой Томсона, включена в список важнейших нерешенных математических проблем 21 века, поэтому представляется весьма значимым определение автором 40 сферических кристаллов, обладающих энергиями, меньшими, чем известные ранее структуры с тем же N . Так как математически для этих N проблема Томпсона не решена, то вполне возможно, что полученные структуры являются решениями проблемы Томпсона.

Д.С. Рошаль, на примере устройства бактериофага Т4, предложена модель рациональной соразмерности между внутренней периодической трубкой и конечным фрагментом внешней трубки. Автором показано, что если длина внутренней трубки вдоль общей оси больше, чем длина внешней, то наиболее энергетически выгодная (рационально соразмерная) ситуация реализуется когда длина внешнего трубчатого фрагмента оказывается равной полуцелому количеству периодов внутренней трубки. В частности, показано, что именно такое соотношение (с коэффициентом 9.5) существует между длиной сжатого чехла и периодом шпаги хвоста бактериофага Т4. Если в (квази)кристаллах оси строго целочисленны, то в биологических объектах распространены нецелочисленные оси; например, согласно Л. Полингу, ось $18/5$ (поворот на $(360^{\circ}:18) \times 5 = 100^{\circ}$) для α -спирали. Поэтому, возможно, что данные результаты диссертационной работы Д.С. Рошаль являются важным подтверждением этой закономерности.

Результаты диссертационной работы Дарьи Сергеевны Рошаль полностью отражены в опубликованных научных статьях и докладах на конференциях.

К тексту автореферата возникают следующие вопросы и замечания.

На рис.1 изображен нерегулярный икосаэдр, который назван икосаэдром с вакантными вершинами. Определение этого многогранника в автореферате отсутствует.

На стр.12 автореферата сказано "В результате были получены 40 сферических кристаллов Возможно, что полученные структуры являются решениями проблемы Томсона". Вместо термина сферический кристалл более точно – сферическая упаковка. На поверхности сферы все же упаковка трехмерных структурных единиц, поэтому для симметричного отображения такой структуры может быть имеет смысл использовать не только триангуляцию 2-мерной сферы, но и разбиения 3-мерной сферы (находящейся в 4-мерном евклидовом пространстве) на тетраэдры. На возможность такого подхода указывает, например, работа "A novel symmetric four dimensional polytope found using optimization strategies inspired by Thomson's problem of charges on a sphere" [arXiv:physics/0601139](https://arxiv.org/abs/physics/0601139).

Несмотря на сделанные замечания, диссертационная работа Рошаль Дарья Сергеевны 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 ее автор Рошаль Дарья Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.15 — Физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика.

Талис Александр Леонидович,
доктор физико-математических наук

по специальности 01.04.18. – кристаллография, физика кристаллов.

Должность: ведущий научный сотрудник.

Организация: ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН (ИНЭОС РАН)», лаборатория физической химии полимеров.

Адрес: 119991, ГСП-1, г.Москва, ул. Вавилова, д.28.

Телефон: 8-499-135-79-10, e-mail: talishome@mail.ru

Согласен на обработку моих персональных данных.

31.08.2021

А.Л. Талис

Подпись Талиса А.Л. заверяю

ученый секретарь ИНЭОС РАН

к.х.н. Е. Н. Гулакова

ПОДПИСЬ
УДОСТОВЕРЯЮ
ОТДЕЛ КАДРОВ ИНЭОС РАН

Отдел
кадров

Специалист по кадрам

Скворцова В.И.

Дата 31.08.2021.