



**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки**  
**Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта**  
**Российской академии наук**  
**(ИМБ РАН)**

Вавилова ул., д. 32, ГСП-1, В-334, Москва, 119991; Для телеграмм: Москва ИМБ РАН В-334,  
тел. 8-499-135-23-11, 8-499-135-11-60; факс 8-499-135-14-05, E-mail: [isinfo@eimb.ru](mailto:isinfo@eimb.ru)  
ОКПО 02699501, ОГРН 1037736018066, ИНН/КПП 7736055393/773601001

В Совет по защите  
докторских и кандидатских диссертаций  
Д 212.263.02 при ФГБОУ ВПО  
«Тверской государственной университет»

Отзыв на автореферат диссертации  
**«МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОДИСПЕРСНЫХ  
ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ»,**  
представленной  
**КОМАРОВЫМ ПАВЛОМ ВАСИЛЬЕВИЧЕМ**  
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Развитие теоретических методов предсказания свойств полимерных систем, содержащих в своем составе наночастицы разного происхождения, представляет собой актуальную задачу вычислительной математики. Сложность этой задачи обусловлена тем, что в настоящее время еще не разработаны строгие методы описания и предсказания свойств наночастиц. Поэтому большое внимание уделяется созданию и развитию гибридных расчетных систем, основанных на применении так называемого «крупномасштабного моделирования», которое представляет собой, по существу, иерархическое рассмотрение взаимосвязей «структура – свойство» при переходе от одного масштабного уровня моделирования на другой. С этой точки зрения актуальность сложной задачи, решаемой Комаровым П.В., не вызывает сомнений. Более того, список основных работ, опубликованных Комаровым П.В., свидетельствует о лидирующей роли автора в области крупномасштабного моделирования как в нашей стране, так

и за рубежом, что, несомненно, подчеркивает большой вклад Комарова П.В. в становление методологии этого научного направления.

Комаров П.В. иллюстрирует свои подходы на нескольких примерах, включающих изучение механизма гелеобразования в растворах, содержащих цистеин и нитрат серебра, анализ возможности самосборки наночастиц золота на двухцепочечной ДНК, анализ транспортных свойств полимерных ионообменных мембран и т.д. Полученные при этом результаты представляют большой интерес не только с теоретической, но и практической точки зрения.

Отмеченное выше показывает, что автореферат Комарова П.В. отражает высокую научную квалификацию автора.

Тем не менее, в работе есть фрагмент, который требует дополнительных пояснений автора. Этот фрагмент - самосборка наночастиц золота на матрице ДНК. Достаточно хорошо известно, что для наночастиц золота характерна не только сложная геометрическая структура (см., например, *C. Louis, O. Pluchery, Gold nanoparticles for physics, chemistry and biology, Imperial College Press, 2012, 395p.*), но подвижность этой структуры, позволяющая использовать даже такое выражение как «желеобразная» структура наночастиц золота.

Ряд литературных фактов представляют интерес в рамках модели «металлизации» ДНК, предлагаемой Комаровым П.В. Во-первых, известно, что наночастицы золота малого размера (около 2 нм) могут встраиваться в бороздки на поверхности молекул ДНК, что открывает возможность для создания своеобразных нанопроводов (*Y. Liu, et al., Gold-Cluster Degradation by the Transition of B-DNA into A-DNA and the Formation of Nanowires, Angew. Chem. Int. Ed. 2003, 42, 2853 – 2857*). Во-вторых, особенности геометрической структуры наночастиц золота определяют высокую вероятность их так называемой «фасетной» самосборки (*S.Kinge, et al., Self-Assembling Nanoparticles at Surfaces and Interfaces, Chem.Phys.Chem., 2008, 9,*



20–42). Наконец, наночастицы золота, связанные с поверхностью молекул ДНК, всегда располагаются между молекулами ДНК (см., например, *A.Kumar, et al., Linear Superclusters of Colloidal Gold Particles by Electrostatic Assembly on DNATemplates, Adv. Mater., 2001, 13, 341-344; M.Warner, et al. Linear assemblies of nanoparticles electrostatically organized on DNA scaffolds, Nature materials, 2003, 2,272-277; Yu. M. Yevdokimov, et al.,Gold Nanoparticle Clusters in Quasinematic Layers of Liquid-Crystalline Dispersion Particles of Double-Stranded Nucleic Acids, Acta naturae, 2012, 4 , 52-64).*

В принципе, эти результаты противоречат модели расположения наночастиц золота, рассматриваемых автором в виде «бесструктурных сферических силовых центров», которая представлена на рис.2 автореферата. Следовательно, пояснения автора к этой части работы, как минимум, необходимы.

Высказанные мною замечания, относящиеся к системе «ДНК + наночастицы золота», продиктованные моим личным интересом к получению дополнительной информации о свойствах этой системы, не снижают, с моей точки зрения, общего весьма положительного впечатления о научном содержании работы, выполненной Комаровым П.В.

Все сказанное выше свидетельствует о том, что диссертация Комарова П.В. представляет собой вполне законченный научный труд, а сам автор заслуживает, без сомнения, присуждения ему искомой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04-физическая химия.

Главный научный сотрудник ИМБ РАН,

Профессор, доктор хим. наук

*Ю. Евдокимов*

Евдокимов Ю.М.

Москва, 13 мая 2014 г.

