

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Шелеповой Екатерины Алексеевны «Исследование свободного объема в молекулярно-динамических моделях липидных мембран и ионных жидкостей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа посвящена исследованию влияния глицирризированной кислоты на липидные мембраны и растворению газов в ионных жидкостях. Работа является актуальной и ориентирована на решение практически значимых задач, поскольку цифровое моделирование атомно-молекулярных систем, в том числе, липидных мембран и их аналогов, ускоряет темпы прогнозов физико-химических свойств, биологической активности и, соответственно, востребовано в задачах получения новых материалов, которые имеют прямое отношение к контролю проницаемости мембран. Выбор методов исследования: классическая молекулярная динамика и анализ свободного объема методом Вороного-Делоне, хорошо обоснован. В работе доказано, что механизм усиления проницаемости мембран не связан с образованием пустот. Как достоинство работы следует отметить то, что был проведен дополнительный подробный анализ оболочек, лежащих на разных расстояниях от молекулы глицирризированной кислоты.

Имеются замечания. 1) В исследовании растворимости газов на защиту выносятся корреляция привнесенных свободных объемов растворенных газов в ионных жидкостях с растворимостью этих газов. Не очевидно, в каком виде представлены газы в моделировании: в виде отдельных молекул, ансамблей или пузырьков, и почему именно так. При этом в работе исследуются газы:  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CH}_4$ , которые могут существовать в ионных жидкостях в разном виде. Также не очень понятен выбор газов: говорится, что  $\text{CO}_2$  выбран в связи с интересом к экологическим проблемам, но существуют и другие парниковые газы, такие как, например,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NO}_2$  и др., которые также заметно влияют на экологию, но не были рассмотрены в работе. 2) В методике моделирования говорится, что были отобраны крупнозернистые модели ионных жидкостей и нейтральных аналогов без пояснения критерия «зерен» системы. 3) В автореферате несколько раз присутствуют повторы целых предложений.

Диссертационная работа «Исследование свободного объема в молекулярно-динамических моделях липидных мембран и ионных жидкостей» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Шелепова Екатерина Алексеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку. Д.х.н. (02.00.04 – Физическая химия), доцент, профессор кафедры теоретической и прикладной химии, в.н.с., зав. НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов Барташевич Екатерина Владимировна тел. +79123137705; e-mail: [bartashevichev@susu.ru](mailto:bartashevichev@susu.ru)

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку М.н.с. НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов Бородина Ольга Сергеевна тел. +79123115488; e-mail: [borodinaos@susu.ru](mailto:borodinaos@susu.ru)

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: +7 (351) 267-99-00 [info@susu.ru](mailto:info@susu.ru), <http://www.susu.ru>

  
31.05.2023

  
31.05.2023



УДОСТОВЕРЯЮ  
Начальник отдела кадров  
Университета  
СТАРИКОВА Е.А.