

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

В автореферате диссертационной работы Шелеповой Е.А. представлены результаты исследования свободного объема в сложных молекулярных системах на примере липидных бислоев и ионных жидкостей. Свободный объем играет важную роль в проявлении различных физико-химических свойств веществ, например, диффузии, растворимости, проницаемости, поэтому количественный анализ характеристик свободного объема в структуре жидкофазных систем, несомненно, является актуальной задачей. Научная новизна и оригинальность полученных результатов определяются в значительной мере тем, что диссертант при анализе молекулярно-динамические модели использовала подходы на основе метода Вороного-Делоне. Последний хорошо зарекомендовал себя при работе с простыми атомными системами, здесь же он применен к сложным молекулярным системам. Результаты диссертационного исследования убедительно доказывают, что данный количественный подход может продуктивно использоваться в более широкой области, что является важным итогом работы.

Полученные данные позволили автору дать новую информацию о структуре липидных бислоев, содержащих глицирризиновую кислоту, а также о структурных особенностях ряда имидазолиевых ионных жидкостей. Интересные результаты представлены диссертантом при обсуждении проблемы селективности растворения газов в ионных жидкостях на примере сравнения растворов CO_2 и других газов, присутствующих в атмосфере, O_2 , N_2 , CH_4 . Установлено, что CO_2 при растворении в имидазолиевых ионных жидкостях вносит заметно меньший дополнительный свободный объем, чем другие газы. Это коррелирует с их растворимостью - CO_2 растворяется в этих жидкостях значительно лучше. Представленные результаты имеют и практическую значимость. В частности, они могут быть востребованы в направленном поиске новых ионных жидкостей с высокой селективностью растворения газов.

Надежность и достоверность полученных Шелеповой Е.А. результатов обеспечивается использованием в работе апробированных методов и согласованием с имеющимися литературными данными. Результаты работы опубликованы в 7 статьях в высокорейтинговых журналах и представлены в докладах на 10 конференциях различного уровня.

Автореферат написан хорошим языком, снабжен большим количеством иллюстраций, что существенно облегчает понимание деталей работы.

При прочтении автореферата возникли незначительные замечания:

1. При описании результатов главы 4 на стр. 15 и 16 автор использует термин «зерна» системы, но не дает его определения. Что автор имеет в виду под «зернами»?

2. В тексте автореферата присутствует некоторое количество опечаток, орфографических ошибок (в основном, пунктуационных), а также ряд неудачных выражений и терминов: например, с. 3 - аспекты свободного объема и с. 9 - аспекты межмолекулярных пустот (корректно - характеристики свободного объема или межмолекулярных пустот); с. 6 и с. 9 - лекарственные молекулы (правильно - молекулы лекарственных соединений), с. 6 - «...интерпретация структуры как ионных жидкостей, так и других солей...» (правильно - расплавов других солей), с. 15 - «проявляется ... на распределении атомов» (правильно - в распределении атомов).

Вышеприведенные замечания носят частный характер и не ставят под сомнение результаты и выводы работы.

В целом, судя по автореферату, можно сделать заключение о том, что диссертационная работа Шелеповой Е.А. выполнена на высоком современном научном уровне.

Считаю, что 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.

Федотова Марина Витальевна

доктор химических наук, профессор

специальность 02.00.04 - физическая химия

главный научный сотрудник научно-исследовательского отдела (НИО) 6

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова

Российской академии наук (ИХР РАН)

153045, Россия, г. Иваново, ул. Академическая, 1

Тел. +7 (4932) 33 62 65,

Электронная почта: hebrus@mail.ru

Федотова

26.05.2023

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку

Подпись Федотовой М.В. заверяю

Ученый секретарь ИХР РАН

к.х.н.

26.05.2023



К.В. Иванов