

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 Шелеповой Е.А. посвящена объяснению структурных особенностей, наблюдаемых в липидных бислоях (чистых и содержащих глицирризиновую кислоту), а также в ионных жидкостях (в том числе в смесях с газами), с помощью молекулярно-динамического моделирования и анализа межмолекулярных пустот.

В автореферате автором указана общая характеристика диссертационной работы: сформулированы актуальность и цель проведенного исследования, положения, выносимые на защиту. Данные, представленные в диссертационной работе, были представлены на 10 конференциях, а также опубликованы в 6 статьях, что убедительно свидетельствует о высоком уровне проведенного исследования. Результаты, отраженные в автореферате, безусловно, являются новыми и имеют важное фундаментальное значение. Автореферат хорошо структурирован. Выводы отражают элементы новизны и соответствуют поставленным задачам.

При прочтении работы возникло несколько вопросов и замечаний.

1. Почему при моделировании ионной жидкости (ИЖ) $[C_4MIM][PF_6]$ используется крупнозернистая модель, а для ИЖ $[C_nMIM][NTf_2]$ полноатомная модель?
2. При исследовании влияния кулоновского взаимодействия на межмолекулярные пустоты использовалось моделирование в NVT ансамбле для сохранения одинаковой плотности. Однако изменение зарядов частиц очень сильно влияет на получаемую при моделировании плотность ИЖ, что повлияло бы и на размер межмолекулярных пустот.
3. При моделировании липидных бислоев были получены модели с одной и четырьмя молекулами глицирризиновой кислоты. В тексте автореферата не указано, одинаковые ли получаются результаты для этих моделей.
4. Для обозначения одной из ИЖ используется два обозначения $[BMIM][PF_6]$ и $[C_4MIM][PF_6]$. Стоило остановиться на одном из них. В текст автореферата используется обозначение ФРР, которое нигде не объясняется.

Высказанные замечания не носят принципиального характера и не меняют хорошего впечатления от представленной работы.

Считаю, что диссертационная работа « *Исследование свободного объема в молекулярно-динамических моделях липидных мембран и ионных жидкостей* » отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., 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.

Художитков Александр Эдуардович
кандидат физико-математических наук
специальность 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук (ИК СО РАН)
630090, Россия, г. Новосибирск, пр. акад. Лаврентьева, д.5
Тел. 8(383)3269578,
Электронная почта: alexandr.khudozhitkov@gmail.com
01.06.2023

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

Подпись Художиткова А.Э. заверяю

Ученый секретарь ИК СО РАН

к.х.н.



М.О. Казаков