

ОТЗЫВ

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

Процессы в жидких системах играют важнейшую роль в живой природе. Поэтому их исследование представляет постоянный научный и практический интерес. При изучении жидкого состояния особое внимание уделяется наличию в системе свободного межмолекулярного пространства, которое определяет подвижность молекул, растворимость веществ, а также оказывает влияние на процессы проницаемости через мембраны, что очень важно для понимания биохимических процессов.

Актуальность диссертационной работы не вызывает сомнений, т.к. она посвящена изучению важных для химии, биохимии, экологии процессов и веществ: липидных мембран, ионных жидкостей, растворимости газов. Применяемый метод молекулярно-динамического моделирования позволяет для таких сложных систем провести количественное исследование свободного межмолекулярного пространства и получить структурную информацию об изучаемых объектах. В диссертации исследуются структурные особенности липидных биослоев, как чистых, так и содержащих глицерризиновую кислоту; ионных жидкостей и растворов газов (CO_2 , O_2 , N_2 , CH_4) в них. Результаты таких исследований представляют большой интерес с точки зрения физики жидкостей, физико-химии растворов и понимания некоторых биологических процессов, процессов разделения газовых смесей а также нахождения эффективных поглотителей диоксида углерода в плане решения проблем экологии.

Достоверность полученных автором результатов подтверждается современной реализацией метода Вороного-Делоне, который позволяет анализировать как свободный объем, так и межмолекулярные полости. В работе использованы надежные силовые поля для объектов молекулярно-динамического моделирования, которое выполнено качественно и на высоком уровне. Впервые были рассчитаны доли свободного объема, относящиеся к различным компонентам ионной жидкости. При этом показано, что свободный объем, относящийся к анионам и катионам имидазолия, не зависит от длины алкильного заместителя. Также следует отметить заключение о том, что структура ионной жидкости определяется непроницаемостью атомов, независимо от наличия зарядов на ионах. Выводы по работе в целом обоснованы и полностью отражают результаты выполненного исследования.

Основные результаты диссертации опубликованы в семи статьях в научных журналах, рекомендованных ВАК РФ. Особо следует отметить, что шесть статей относятся к первому квартилю Q1 – это превосходный результат. Кроме того, работа прошла апробацию на многочисленных международных и всероссийских конференциях. Все публикации соответствуют тематике исследования. Автореферат ясно передает содержание диссертации.

При чтении автореферата возник следующий вопрос:

1. Известно, что диоксид углерода может поглощаться ионными жидкостями как за счет физической, так и химической абсорбции. Есть ли уверенность в том, что в данном случае не происходит химического взаимодействия с компонентами ионной жидкости?

В целом следует дать высокую оценку диссертационной работе, которая выполнена на высоком уровне и представляется очень интересной.

На основании представленного автореферата можно сделать вывод, что диссертационная работа Шелеповой Екатерины Алексеевны «Исследование свободного объема в молекулярно-динамических моделях липидных мембран ионных жидкостей» по

актуальности, научной новизне и практической значимости, обоснованности научных положений и выводов, полноте опубликования материала соответствует критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 года (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, 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.

Главный научный сотрудник, руководитель группы «Структура и динамика молекулярных и ион-молекулярных систем» доктор химических наук, профессор; тел. +7(4932)351679; Email: amk@isc-ras.ru

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

30.05.2023 г.

Колкер Аркадий Михайлович



Старший научный сотрудник, руководитель группы «Численное моделирование биологически активных веществ, их растворов и многокомпонентных флюидных смесей», кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник; тел. +7(4932)351869; Email: vep@isc-ras.ru согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

30.05.2023 г

Петренко Валентина Евгеньевна



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН)
153045, г. Иваново, ул. Академическая, 1, Тел./факс (4932) 336259 / 336265; E-mail: adm@isc-ras.ru, <http://www.isc-ras.ru>

Подписи Колкера А.М. и Петренко В.Е. заверяю:
Ученый секретарь ИХР РАН



к.х.н. Иванов К.В.