

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.150.01 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ ИМ. В. В. ВОЕВОДСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 15.06.2022, № 16

О присуждении Кадцыну Евгению Дмитриевичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата химических наук.

Диссертация *«Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики»* в виде рукописи по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» принята к защите 13 апреля 2022 г., протокол № 11, диссертационным советом 24.1.150.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, приказ о создании диссертационного совета № 1511/нк-от 25.11.2016 года.

Соискатель, *Кадцын Евгений Дмитриевич*, 1993 года рождения, на момент защиты диссертации работает в должности младшего научного сотрудника ИХКГ СО РАН. В 2021 году соискатель окончил аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (НГУ). С 2014 года Е.Д. Кадцын работает в ИХКГ СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории молекулярной динамики и структуры ИХКГ СО РАН.

*Научный руководитель* – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник *Медведев Николай Николаевич*, заведующий лаборатории молекулярной динамики и структуры ИХКГ СО РАН.

*Официальные оппоненты:*

1. *Федотова Марина Витальевна*, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории ЯМР-спектроскопии и численных методов исследования жидких систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН);

2. **Гец Кирилл Викторович**, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории клатратных соединений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН);

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

*Ведущая организация*, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (КФУ), в своём **положительном заключении**, подписанном доктором химических наук, доцентом, ведущим научным сотрудником лаборатории физико-химических исследований химического института им. А.М. Бутлерова КФУ **Седовым Игорем Алексеевичем**, утверждённом и.о. ректора КФУ, доктором физико-математических наук, профессором **Таюрским Дмитрием Альбертовичем**, указала, что данная диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённом Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в текущей редакции), а её автор, Кадцын Е.Д., заслуживает присвоения ему искомой учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

В положительном заключении ведущей организации имеются следующие замечания и вопросы.

1. В разделе, посвященном актуальности работы, написано, что в водных растворах неэлектролитов «проходят важнейшие биологические процессы», хотя на самом деле все биологические жидкости содержат неорганические соли и высокие концентрации белков, и их свойства сильно отличаются от свойств растворов низкомолекулярных органических веществ.

2. Случайное добавление твердых шаров в ячейку приводит к неравновесным конфигурациям. Их можно было бы дополнительно уравновесить с помощью метода Монте-Карло, при этом функция радиального распределения изменится. Почему при сравнении с равновесными системами из реальных молекул этого не делалось?

3. При подстройке функций радиального распределения молекул ТВА, мочевины и ТМАО под левый склон функции радиального распределения твердых шаров первые масштабируются. При этом число молекул внутри сферы определенного радиуса (например, соответствующего максимуму первого пика или последующему минимуму), определяемое через интеграл функции радиального распределения, явно не будет равно числу твердых сфер внутри того же объема при их одинаковой средней численной плотности. Почему

подстраиваются именно масштабированные кривые и насколько реалистично подобное описание?

4. Присутствует также заметное количество грамматических, орфографических и пунктуационных ошибок, а также неудачных оборотов (например, «свойства растворов, извлекаемые из экспериментальных данных», «в эксперименте чаще работают со свободной энергией Гиббса  $G$ », «уравнение Рейдлица-Кистера», «насыщенного пара компонента над растворами»).

Соискатель имеет 7 научных работ (из них 6 по теме диссертации), опубликованных в отечественных и международных рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК. Десять работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

*Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:*

1. Anikeenko A. V., **Kadtsyn E.D.**, Medvedev N.N. Statistical geometry characterization of global structure of TMAO and TBA aqueous solutions // J. Mol. Liq. 2017. Vol. 245. P. 35–41.
2. **Kadtsyn E.D.**, Anikeenko A.V., Medvedev N.N. Statistical geometry characterization of local structure of TMAO, TBA and urea aqueous solutions // J. Mol. Liq. 2019. Vol. 286. P. 110870.
3. **Kadtsyn E. D.**, Nichiporenko V. A., Medvedev N. N. Volumetric properties of solutions on the perspective of Voronoi tessellation // J. Mol. Liq. – 2022. Vol. 349. P. 118173.
4. Аникеенко А.В., Зеликман М.В., Кадцын Е.Д., Медведев Н.Н. Моделирование глицирризиновой кислоты с холестерином в метаноле // Журнал Структурной Химии. 2017. Т. 58. № 2. С. 285–292.
5. **Кадцын Е.Д.**, Аникеенко А.В., Медведев Н.Н. Строение водных растворов триметиламинооксида, мочевины и их смеси // Журнал структурной химии. 2018. Т. 59, № 2. С. 359–367.
6. **Кадцын Е.Д.**, Ничипоренко В.А., Медведев Н.Н. Использование разбиения Вороного для интерпретации объемных свойств раствора // Журнал структурной химии. 2021. Т. 62, № 1. С. 61–72.

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов. Все отзывы положительные, из них три содержат замечания. Отзывы поступили от:

- доктора химических наук, профессора *Коренева Сергея Васильевича*, профессора кафедры общей химии факультета естественных наук НГУ, заместителя директора, заведующего лабораторией химии редких платиновых металлов ИНХ СО РАН;
- доктора химических наук, профессора *Колкера Аркадия Михайловича*, главного научного сотрудника лаборатории молекулярных и ион-молекулярных систем ИХР РАН и кандидата химических наук *Егорова Геннадия Ильича*, ведущего научного сотрудника лаборатории молекулярных и ион-молекулярных систем ИХР РАН;
- доктора химических наук, доцента *Барташевич Екатерины Владимировны*, профессора кафедры теоретической и прикладной химии, ведущего научного сотрудника, заведующей НИИ многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»;
- кандидата химических наук *Поповецкого Павла Сергеевича*, старшего научного сотрудника лаборатории химии экстракционных процессов ИНХ СО РАН;
- кандидата физико-математических наук, доцента *Стася Дмитрия Владимировича*, доцента кафедры общей физики физического факультета НГУ, старшего научного сотрудника лаборатории быстропротекающих процессов ИХКГ СО РАН.

Из отзывов на автореферат два не содержат замечаний (*Стась Д.В., Барташевич Е.В.*). В остальных имеются следующие вопросы и замечания: (1) о неясности понятия глобальной структуры раствора (*Корнев С.В., Колкер А.М., Егоров В.И.*); (2) об отсутствии указания температуры, при которой проводилось моделирование (*Колкер А.М., Егоров В.И.*); (3) о влиянии другого геометрического описания растворенных молекул (не шары) на свойства растворов (*Корнев С.В.*); (4) о причинах понижения кривой среднего размера кластера в растворах ТМАО в сравнении с системой случайных шаров (рис. 5), о варианте термина “мольный объем Вороного компонента” (*Поповецкий П.С.*). Кроме того, есть ряд замечаний терминологического характера.

В положительных отзывах оппонентов имеются следующие замечания и вопросы:

**Федотова М.В.:**

- о представлении в выводах результатов исследования ассоциатов глицирризиновой кислоты и холестерина в метаноле, а также о исследованном изомере кислоты;
- о возможности учета неидеальности формы молекулы в разработанном автором подходе сравнения раствора с идеальной геометрической системой;

- о небольшом плече на левом склоне ФРР для центров молекул ТВА и связи его с образованием водородной связи через гидроксильную группу;
- о процессе, к которому относятся термины «увеличение свободной энергии», «рост свободной энергии», «уменьшение энтропии» на стр. 101;
- сделан ряд замечаний технического и стилистического характера.

**Гец К.В.:**

- о значении понятия «глобальная структура» раствора;
- о зависимости исследуемой модели от особенностей формирования стартовой конфигурации;
- о правилах смещения параметров ван-дер-ваальсовых взаимодействий и значениях релаксационных времен термостата и баростата;
- о том, что известно в литературе о строении растворов ТМАО и в какой мере это соотносится с выводами автора;
- о расчете ФРР между молекулами растворенного вещества и растворителя, поскольку это несложно сделать и что было бы полезно при обсуждении гидратных оболочек.

Во всех отзывах отдельно отмечается, что указанные замечания не снижают научной и практической значимости диссертационной работы. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Кадцына Е.Д. **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор – Кадцын Е.Д. – заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

*Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается* компетентностью оппонентов и сотрудников ведущей организации в области физической химии водных растворов органических молекул, что подтверждается наличием у них публикаций в данной области исследований, в том числе соответствующих тематике диссертационного исследования соискателя, которые опубликованы в ведущих российских и международных журналах.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

*Разработаны* новые методы для анализа молекулярно-динамических моделей растворов, позволяющие исследовать строение растворов как на локальном, так и на глобальном уровне.

*Реализован* подход, позволяющий сравнивать структуру раствора со структурой системы случайных твердых шаров, что помогает разделить «геометрический» и «химический» вклады в изучаемые характеристики растворов.

*Предложены* новые методы и подходы, основанные на разбиении Вороного и позволяющие связать молекулярную структуру и наблюдаемые термодинамические объемные свойства растворов.

*Показано*, что молекулы ТМАО в растворе ведут себя как случайные шары на всем исследованном диапазоне концентраций; молекулы мочевины и ТМАО не влияют на взаимное расположение друг друга в тройных растворах; дано объяснение наблюдаемому минимуму на кривой парциального мольного объема ТВА, показано, что это вызвано изменением характера ассоциации молекул ТВА при малых концентрациях.

**Теоретическая и практическая значимость исследования обоснована тем, что:**

- разработанные методы и алгоритмы могут быть применены к различным растворам и использованы другими исследователями для извлечения физико-химической информации из молекулярно-динамических моделей;

- полученные данные о структуре и свойствах двойных и тройных водных растворов ТМАО и мочевины важны для понимания их совместного влияния на белок;

- интерпретация на молекулярном уровне свойств растворов ТВА может быть использована для объяснения поведения растворов других молекул, проявляющих гидрофобные свойства;

- развитый подход для нахождения собственного объема компонентов в растворе, открывает возможности для структурной интерпретации термодинамических свойств раствора.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:**

- исследуемые модели получены с использованием апробированных программ молекулярно-динамического моделирования и известных силовых полей для описания межмолекулярных взаимодействий;

- полученные результаты согласуются между собой и с известными в литературе экспериментальными данными;

- научные результаты прошли квалифицированную экспертизу, обсуждались на отечественных и международных конференциях и опубликованы в научных журналах высокого уровня.

**Личный вклад соискателя состоит** в участии в постановке научных задач, анализе и обобщении литературных данных, обсуждении результатов и подготовке текстов публикаций по теме диссертации. Автором лично было выполнено молекулярно-динамическое

моделирование, проведен анализ полученных моделей стандартными и собственными программами, введено понятие мольного объема Вороного, выведены формулы, выражающие объемные свойства растворов через мольные объемы Вороного.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченное исследование с актуальными задачами и содержательными, фундаментальными и практически важными результатами. Материалы диссертации соответствуют требованиям специальности 1.3.17 «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (п. 3 «Молекулярная динамика, межмолекулярные потенциалы и молекулярная организация веществ, компьютерная молекулярная динамика как метод диагностики структуры и динамики веществ»). Соискатель Кадцын Е.Д. успешно ответил на все задаваемые ему вопросы присутствующими на заседании, на замечания, приведенные в отзыве ведущей организации и отзывах на автореферат. Соискатель дал четкие аргументированные ответы по научным вопросам и согласился со всеми техническими замечаниями и пожеланиями.

На заседании 15 июня 2022 г. диссертационный совет постановил: за решение научной задачи исследования водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики на примере растворов триметиламин-N-оксида, трет-бутанола и мочевины присудить *Кадыну Евгению Дмитриевичу* учёную степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании и голосовании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени - 20, против присуждения учёной степени - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета,

д-р хим. наук, доцент



Онищук Андрей Александрович

Ученый секретарь диссертационного совета,

канд. хим. наук

Поздняков Иван Павлович

15.06.2022 г.