

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Кадцына Евгения Дмитриевича «ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ», представленной на соискание ученой степени кандидата химических по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Кадцына Евгения Дмитриевича посвящена теоретическому моделированию и исследованию структурных аспектов строения водных электролитов на основе триметиламин-N-оксида, мочевины и трет-бутанола, методами, опирающимися на построение молекулярно-динамических моделей.

Практическая значимость работы обоснована тем, что выбранные объекты – водные электролиты служат основой для протекания процессов в химической промышленности, используются при синтезе новых материалов и лекарств, применяются в народном хозяйстве. Кроме того, развиваемая методология молекулярно-динамического моделирования свойств растворов актуальна и важна для перспектив быстрого и достоверного прогнозирования практически значимых термодинамических характеристик жидкостей, поскольку нацелена на нетривиальную задачу учета неоднородностей в расположении молекул, особенностей локальной и глобальной структуры в растворах неэлектролитов.

В диссертационной работе получены молекулярно-динамические модели растворов в с малым шагом по концентрации для осмолитов: мочевины и триметиламин-N-оксида, проведен детальный анализ строения раствора трет-бутанола. Разработаны новые подходы, являющиеся частью методологии, нацеленной на получение и систематизацию информации о влиянии структуры на объемные свойства растворов. Методология опирается на использование разбиения Вороного, введено понятие “мольного объема Вороного”, который является геометрическим объемом, приписанным компоненту в растворе, и может быть рассчитан с использованием методов молекулярной динамики.

Работа содержит в себе потенциал, который можно направить решение актуальных задач разработки новых информативных моделей растворов неэлектролитов при варьирующейся концентрации и составе. Обоснованность и достоверность полученных результатов базируется на согласии теоретических результатов и экспериментальных данных, взятых из литературных источников.

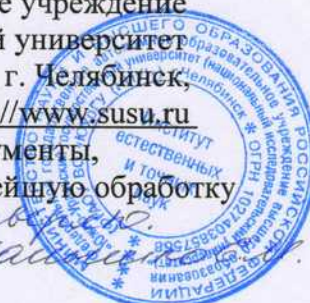
Считаю, что диссертационная работа «Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, *Кадцын Евгений Дмитриевич*, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

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 ЮУрГУ Барташевич Екатерина Владимировна  
тел. +79123137705; e-mail: [bartashevichev@susu.ru](mailto:bartashevichev@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>

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

*Подпись Барташевич Е.В. зав. НИЛ*  
*Начальник УМО ИБТН ЕФ-Кадцын*



*Е.В. Барташевич*

05.06.2022