

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 исследованию свободного объема в молекулярно-динамических моделях липидных бислоев и ионных жидкостей с помощью анализа межмолекулярных пустот методом Вороного-Делоне. Проведенные исследования являются важными и актуальными, поскольку свободный объем влияет на многие физико-химические свойства вещества, в том числе на проницаемость липидных мембран и на растворимость газов в жидкостях.

Интересным результатом диссертационной работы является установление того факта, что глицирризиновая кислота не вызывает образования дополнительных крупных пустот в липидном бислое. Установление этого факта показывает несостоятельность существующих гипотез, которые объясняют повышение проницаемости липидных мембран образованием таких пустот. Было бы интересно увидеть также аргументы в пользу других объяснений этого свойства глицирризиновой кислоты, однако этому вопросу в автореферате не уделено внимания. Следует отметить, что при исследовании ионных жидкостей соискателем получены новые результаты, имеющие отношение к проблеме селективности растворения газов. Показано, что молекула углекислого газа при растворении формирует для себя пору, объем которой существенно меньше, чем для других атмосферных газов, что коррелирует с его высокой растворимостью. Следует отметить также методическую ценность данной диссертационной работы, в которой показана возможность применения метода Вороного-Делоне к анализу сложных молекулярных систем, что своевременно, поскольку сейчас появляются

новые модели, которые требуют количественного анализа межмолекулярных пустот.

Исследование проведено диссертантом на хорошем научном уровне. Достоверность полученных результатов не вызывает сомнения. Использованные материалы опубликованы в 7 статьях в научных журналах, входящих в базы данных Scopus и Web of Science, а также апробированы на 10 отечественных и международных конференциях.

В качестве пожелания можно отметить, что диссертант не уделила в автореферате достаточно внимания проблеме усиления проницаемости мембран в присутствии глицирризиновой кислоты.

Однако это не влияет на научную ценность полученных результатов и на общую положительную оценку работы. 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*, достойна присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Чуев Геннадий Николаевич,



доктор физико-математических наук (специальность 01.04.08 – физика и химия плазмы),

главный научный сотрудник лаборатории возбудимых сред

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт теоретической и экспериментальной биофизики

Российской академии наук (ИТЭБ РАН)

142290, г. Пущино, Московская обл., ул. Институтская, 3

Тел. +7 (495) 632-78-69,

