

## 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., посвященная объяснению структурных особенностей, в частности свободного объема и локального окружения в двух различных объектах: в липидных бислоях, состоящем из DOPC и DPPC в присутствии и отсутствии глицерризиновой кислоты, а также в ионных жидкостях (в том числе в смесях с газами), с помощью молекулярно-динамического моделирования и анализа межмолекулярных пустот методом Вороного-Делоне.

Липидные бислои и ионные жидкости на данный момент являются достаточно популярными объектами для исследований. Изучение влияния глицерризиновой кислоты на структуру бислоя является не только фундаментальной задачей, но так же имеет значение в ее терапевтическом применении, для изменения проницаемости клеток. Ионные жидкости имеют большой потенциал в широком спектре различных прикладных задачах. Все это что обуславливает **актуальность** и **значимость** данной работы. Автором впервые был использован геометрического подхода Вороного-Делоне для данных объектов, что указывает на **новизну** данного исследования. Использование ионных жидкости и нейтральной смеси подобных молекул в молекулярно-динамическом моделировании для изучения структурных свойств является одной из основных изюминок данной работы. Показанный в работе результат, что все атмосферные газы ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ) привносят дополнительный свободный объем при растворении в ионной жидкости, является очень интересным, и, безусловно, должен быть проверен другими научными группами экспериментально. Теоретические результаты находятся в согласовании друг с другом и с известными в литературе расчетными и экспериментальными данными., что подтверждает **обоснованность** и **достоверность** представленных результатов и выводов. Качественная **методология** исследования позволили соискателю опубликовать ряд статей в ведущих тематических научных журналах. В самом автореферате структурировано, кратко и последовательно изложено содержание диссертационной работы и приведены основные результаты.

Все поставленные задачи исследования были успешно решены. Результаты работы представлены на научных, в том числе международных, мероприятиях, опубликованы в высокорейтинговых специализированных журналах.

К автореферату имеется ряд замечаний и вопросов:


1. В ходе чтения автореферата осталось непонятным, каким образом создавался билипидный слой, каким образом он уравнивался, использовались ли какие либо механические напряжения в плоскости билипидного слоя?
2. В тексте автореферата нет указания на силовые поля, которые использовались в данной работе, вместо этого написано: "Используемые поля сил и параметризации молекул были взяты из литературы.". Указание на то, какие силовые поля использовались в работе, особенно для липидов, для которых в литературе представлено огромное количество разнообразных полей было бы уместнее.
3. Чем вызвано использование конкретных времен моделирования: для билипидного слоя 300 нс в полноатомном моделировании, а для ионных жидкостей 40 нс в крупнозернистом? Можно ли говорить, что меньшее время недостаточно для полного сэмпинга? Происходит ли изменение радиальных распределений при меньшем времени моделирования?
4. Почему при моделировании билипидных слоев не использовались ионы, которые бы воспроизводили межклеточные или внутриклеточные условия ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ) ?
5. В тексте автореферата не упоминается, какие величины использовались для верификации адекватности моделируемой системы с ионными жидкостями, так например был ли расчет энергии абсорбции, вязкости или коэффициентов диффузии для данных систем и сопоставление с экспериментальными значениями?
6. В автореферате написано, что было использовано 119 источников литературы, тогда как в тексте диссертации 199 ссылок.
7. На рисунке 2 используется как обозначение нм, так и пм, на рисунке 6 используется обозначение единиц измерения на английском - pm, а на рисунке 7 на русском - см.
8. В автореферате на осях рисунков использовались запятые, в качестве разделителя целой и дробной части, а в тексте используются точки.

Все упомянутые замечания и вопросы носят скорее технический характер и не влияют на общее положительное впечатление о работе. 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 ред. Постановлений Правительства РФ от 21.04.2016 г. № 335, от 02.08.2016 г. № 748, от 29.05.2017 г. № 650, от 28.08.2017 г. № 1024, от 01.10.2018 г. № 1168, от 20.03.2021 г. № 426, от 11.09.2021 г. № 1539), 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.

Гольшев Виктор Михайлович

кандидат физико-математических наук  
специальность 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества  
научный сотрудник лаборатории структурной биологии

  
22.06.2023

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической биологии и фундаментальной медицины Сибирского отделения Российской академии наук (ИХБФМ СО РАН)

Адрес: 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 8

Телефон: (383) 363-51-50

электронная почта: golyshevsvictor@gmail.com

22 июня 2023 г.

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

Подпись Гольшева В.М. заверяю

Ученый секретарь ИХБФМ СО РАН

к.б.н.

22.06.2023 г.





Е.Б. Логашенко