

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кадцына Евгения Дмитриевича «Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики» представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний.

Изучение процессов в жидких системах и их структур представляет постоянный научный и практический интерес. Жидкости, как физико-химические системы сложны как для экспериментального, так и для теоретического исследования. Это требует комплексного использования различных подходов к исследованиям и сопоставления данных, полученных разными экспериментальными и теоретическими методами. Поэтому получение принципиально новых данных, их сравнение с результатами полученных разными методами, с последующим обобщением для понимания природы этих сложных систем, имеет большое значение.

Актуальность диссертационной работы не вызывает сомнений, т.к. она посвящена изучению структуры водных растворов значимых в биохимии неэлектролитов, структура которых до сих пор активно обсуждается в литературе. В диссертации исследуются водные растворы модельных соединений: трет-бутанола, мочевины и триметиленамин-N-оксида. Известно, что триметиленамин-N-оксид является осмолитом-протектором, он стабилизирует нативную структуру белка и противодействуют денатурирующим факторам. Мочевина, напротив, является денатурантом. Трет-бутанол характеризуется наличием большой гидрофобной группы и проявлением ярко выраженным в воде гидрофобным эффектом. Структуры этих растворов имеют особенности при малых концентрациях неводного компонента, и их исследование позволит понять свойства таких систем, объяснить механизм влияния этих веществ на белок. Результаты таких исследований представляют большой интерес с точки зрения физики жидкостей, физико-химии растворов и понимания некоторых биологических процессов.

Достоверность полученных автором результатов подтверждается использованием оригинального метода дисперсии распределений объемов Вороного растворенных молекул, использованием надежных и апробированных программ для МД моделирования и силовых полей, согласованностью полученных результатов между собой и с известными в литературе экспериментальными данными. Впервые были связаны объемные свойства со структурой раствора на молекулярном уровне. Выводы по работе обоснованы и полностью отражают результаты выполненного исследования.

Основные результаты диссертации опубликованы в шести статьях в научных журналах, рекомендованных ВАК РФ. Кроме того, результаты обсуждались на международных и всероссийских конференциях, где было сделано 10 докладов. Все публикации соответствуют тематике исследования. Автореферат ясно передает содержание диссертации.

При чтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. Из автореферата не ясно, к какой температуре относятся наблюдаемые зависимости в водных растворах. Как известно, структура воды и гидрофобные эффекты сильно зависят от температуры.

2. Что понимает автор под термином «глобальная структура» растворов.

Отмеченные замечания ни в коем случае не снижают высокой оценки диссертационной работы, которая выполнена на высоком уровне и представляется очень интересной.

На основании представленного автореферата можно сделать вывод, что диссертационная работа Кадцына Евгения Дмитриевича «Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики» 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, Кадцын Евгений Дмитриевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний.

Главный научный сотрудник лаборатории «Структура и динамика молекулярных и ион-молекулярных растворов» доктор химических наук, профессор; тел. +7(4932)351679; E mail: amk@isc-ras.ru

Колкер Аркадий Михайлович

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

25.05.2022 г.

Ведущий научный сотрудник лаборатории «Структура и динамика молекулярных и ион-молекулярных растворов» кандидат химических наук, старший научный сотрудник; тел. +79807368453; E mail: gie@isc-ras.ru

Егоров Геннадий Ильич

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

25.05.2022 г.

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 Егорова Г.И. заверяю:
Ученый секретарь ИХР РАН



к.х.н. Иванов К.В.