

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации КАДЦЫНА Евгения Дмитриевича на тему
«Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
(специальность 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных
состояний вещества»)

В автореферате диссертации Е.Д. Кадцына представлены основные результаты исследования методом молекулярной динамики строения водных растворов различных органических молекул. В частности, проведено моделирование водных растворов триметиламин-N-оксида (ТМАО) и мочевины, строение которых активно изучается. ТМАО является осмолитом-протектором, противодействующим денатурирующим факторам. Мочевина – это известный денатурирующий агент для белковых растворов. Работа является актуальной, поскольку, несмотря на то, что водные растворы ТМАО и мочевины активно исследуются, вопрос об устройстве этих объектов остается открытым.

Научная новизна работы определяется, тем, что разработано несколько подходов позволяющих с одной стороны сравнить структуру раствора со структурой системы случайных твердых шаров, с другой стороны связать термодинамические объемные характеристики растворов с молекулярной структурой.

Ознакомление с авторефератом оставляет очень хорошее впечатление о диссертационной работе. Налицо грамотно спланированное и тщательно проведенное исследование с большим объемом экспериментальной работы. Следует отметить высокий уровень апробации работы в виде большого числа публикаций в рецензируемых журналах и представлений на многочисленных российских и международных конференциях.

По тексту автореферата имеются следующие вопросы и замечания:

1. Не очень понятно, что имеет ввиду автор под термином «глобальная структура». Относится это только к характеристике неоднородности расположения молекул в пространстве или это можно связать с химическими особенностями компонентов.
2. Из текста автореферата не очень понятно, все ли рассматриваемые молекулы описывались формой идеального шара. Как повлияет другое геометрическое описание растворенных молекул (не шар) на свойства растворов?

Сделанные замечания не меняют положительной оценки работы. Личный вклад автора и уровень апробации работы являются достаточными, по актуальности, новизне, уровню решения поставленной научной задачи.

На основании вышеизложенного 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 ред. Постановлений Правительства РФ от 21.04.2016 №335, от 02.08.2016 №748, от 29.05.2017 №650, от 28.08.2017 №1024, от 01.10.2018 №1168, от 20.03.2021 №426, от 11.09.2021 №1539), а ее автор **Кадцын Евгений Дмитриевич**, безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 - «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Коренев Сергей Васильевич

доктор химических наук

специальность 02.00.01 – неорганическая химия

зам. директора Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,

630090 г. Новосибирск,

пр. ак. Лаврентьева, 3

Тел. (383) 3309490

e-mail: korenev@niic.nsc.ru

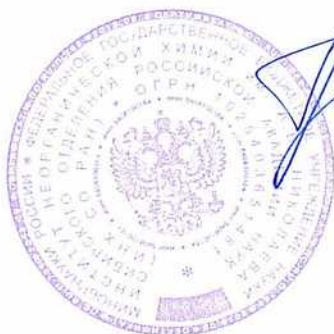
6.06.2022

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

Подпись Коренева С.В. заверяю

Ученый секретарь

ИНХ СО РАН



Герасько О.А.