

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 вещества»

Диссертация Кадцына Е.Д. посвящена исследованию растворов неэлектролитов методом классической полноразмерной молекулярной динамики (МД). В качестве объектов исследования автором выбраны водные растворы триметиламин-N-оксида (ТМАО), трет-бутанола (ТВА) и мочевины, представляющих интерес для биохимических приложений. МД-модели позволяют получить представление о структуре растворов и ее связи с ключевыми термодинамическими характеристиками, предсказать образование супрамолекулярных агрегатов и получить представление об их наиболее вероятном строении. Из МД-моделей растворов можно извлечь огромное количество информации, представляющей интерес для различных областей знаний, что обуславливает высокий уровень актуальности и значимости диссертационного исследования Евгения Дмитриевича. Автореферат имеет классическую структуру, кратко и емко отражает суть диссертационного исследования.

После ознакомления с авторефератом диссертации у меня возник ряд вопросов и замечаний:

- 1. На мой взгляд, в автореферате недостаточно полно представлен анализ предыдущих исследований. Прежде всего, не совсем понятно, какие именно белые пятна имеются в области МД-моделирования растворов неэлектролитов.**
- 2. Называть трет-бутанол гидрофобной молекулой некорректно. Трет-бутанол смешивается с водой, что для гидрофобных молекул несвойственно. Это скорее амфифильная молекула. Также не очень корректно говорить, что трет-бутанол имеет большую гидрофобную группу. В сравнении с жирными спиртами трет-бутильная группа большой не кажется.**
- 3. Предложенный автором термин «мольный объем Вороного компонента» сложно назвать удачным. Формулировка «мольный объем Вороного для компонента» аналогична по смыслу, но значительно более удобна для восприятия.**
- 4. Рисунок 5б и 5в – кривая среднего размера кластеров для ТМАО идет ниже, чем для системы случайных шаров, хотя с точки зрения теории так быть не должно. Это погрешность моделирования или особенность системы?**

Обозначенные в отзыве замечания носят скорее редакционный характер и не ставят под сомнение саму суть работы и защищаемые положения. Полученные автором результаты представляют значительный интерес в области физико-химии растворов. Автор имеет ряд публикаций в рецензируемых научных изданиях, в том числе 3 статьи в высокорейтинговом журнале первого квартиля Journal of Molecular Liquids.

Считаю, что данная работа соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, соответствует пункту 3 паспорта заявленной специальности «1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества», а ее автор Кадцын Евгений Дмитриевич заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. ак. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН)
Старший научный сотрудник
лаборатории химии экстракционных процессов
кандидат химических наук



П.С. Поповецкий

Подпись кандидата химических наук Павла Сергеевича Поповецкого заверяю.

Ученый секретарь ИНХ СО РАН
Доктор химических наук



О.А. Герасько