

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**

Представленная работа посвящена развитию компьютерных методов исследования структуры растворов на основе подходов молекулярной динамики. В качестве конкретных изучаемых объектов выбраны водные растворы трех практически важных соединений, для которых, как показано автором, реализуются три разных типа структуры: инертных твердых шаров (триметиламин-N-оксид), ажурных «прозрачных» ассоциатов, не модифицирующих объемлющую структуру водной матрицы (мочевина), и губчатой структуры из относительно компактных взаимно перколирующих областей растворителя и сольвата для малых гидрофобных молекул (трет-бутиловый спирт). В работе применяются традиционные методы интерпретации расчетной структуры на основе построения и анализа RDF, более специализированные методы анализа степени связности и цикличности молекулярных графов, а также геометрические методы анализа структуры на основе разбиения Вороного-Делоне, развиваемые в лаборатории, где выполнена работа. Важным фактором успеха работы является возможность самостоятельно генерировать достаточно крупные и надежные МД модели исследуемых систем, позволяющие с требуемым шагом покрыть представительные диапазоны концентраций изучаемых бинарных и тройных систем. Особое внимание в работе обращено на выявление связей доступных к расчету из данных МД моделирования структурных характеристик с доступными экспериментальному измерению термодинамическими параметрами реальных растворов. В целом работа представляет собой яркий пример современного компьютерного эксперимента полного цикла, от построения модели до интерпретации получаемых результатов на доступном специалистам из смежных областей языке, в очень востребованной области физико-химии растворов с акцентом на биологически важные водные растворы осмолитов. Коллектив, в котором работает автор, является одним из признанных и активно работающих мировых лидеров в области развития методов геометрического описания структуры неупорядоченных сред, и корректность выбранных для проводимого исследования методов и подходов не вызывает сомнений.

В представленной работе проведен весьма значительный объем исследований как в плане генерации первичного материала компьютерного эксперимента, так и в плане его обработки и осмысления. Работа содержит ряд интересных методически находок по каждому из развиваемых в ней направлений. В части анализа RDF можно отметить сравнение с системами твердых шаров для выделения геометрического фактора исключенного объема, при анализе молекулярных кластеров и перколяционного поведения – изучение степени цикличности получаемых графов как меры их компактности или, наоборот, ажурности. Очень интересным представляется предложенный в работе анализ дисперсии распределения объемов многогранников Вороного как корректно определяемой количественной меры неоднородности глобальной структуры раствора. Автор также предложил целый набор расчетных макроскопических характеристик для связи получаемой в МД моделировании мгновенной структуры раствора с его термодинамическими свойствами. Я не уверен, что все они войдут в активный оборот для обмена информацией между специалистами из разных областей, но вполне возможно, что, например, мольный объем Вороного и его зависимость

от температуры со временем станет такой же стандартной табличной характеристикой раствора, как плотность или показатель преломления.

Работа весьма логично поставлена и выполнена, изложена дружественным к читателю языком и хорошо воспринимается, текст вычитан и практически не содержит опечаток. Отдельно хочу отметить включение в работу заключительной, шестой, главы, осмысляющей и систематизирующей содержание предшествующих глав с оригинальными результатами автора и его коллег, что говорит о достигнутом исследовательском уровне автора. Работа хорошо опубликована и апробирована, вопросов к представленным результатам и их интерпретации не возникает, объем проведенных исследований несомненно достаточен для представления диссертации.

Результаты проведенных исследований опубликованы в профильных международных физико-химических журналах и неоднократно докладывались на конференциях. Считаю, что диссертационная работа «Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики» соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения 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), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, и является научно-квалификационной работой, в которой решена задача развития методов анализа молекулярно-динамических моделей растворов для изучения их локальной и глобальной структуры, что может быть использовано для установление связи между молекулярной структурой и экспериментально измеряемыми объемными свойствами растворов и в перспективе для объяснения механизмов стабилизации структур биологических макромолекул в растворе, а ее автор, Кадцын Евгений Дмитриевич, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.



Стась Дмитрий Владимирович,
К.ф.-м.н., специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества,
доцент, старший научный сотрудник Лаборатории быстропротекающих процессов
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Институтская ул., 3; <http://www.kinetics.nsc.ru/>
Телефон (раб.): (383) 333 1561, электронная почта: stass@ns.kinetics.nsc.ru
27 мая 2022 г.

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

Подпись Стась Д. В. удостоверяю



Член секретарь
ИХКГ СО РАН
К.Ф.-М.Н.
Пырева А.П.