

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.190.06  
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ «ПЕТРОЗАВОДСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 10 июня 2015 г. , протокол № 9  
о присуждении **Журкину Дмитрию Викторовичу**, гражданину Российской  
Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Свойства цепных молекул – компонентов мембранных систем. Компьютерное моделирование»* в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите *24 марта 2015 г.*, протокол № 4 диссертационным советом Д 212.190.06 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Петрозаводский государственный университет» (ФГБОУ ВПО ПетрГУ) (185910, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33, действующего на основании приказа Министерства образования и науки Российской Федерации №156/нк от 1 апреля 2013 года).

Соискатель Журкин Дмитрий Викторович, 1987 года рождения, окончил магистратуру ФГБОУ ВПО ПетрГУ по направлению «Физика» в 2011 г. В 2015 году окончил очную аспирантуру ФГБОУ ВПО ПетрГУ по направлению 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена на кафедре физики твердого тела физико-технического факультета ФГБОУ ВПО ПетрГУ.

*Научный руководитель* - старший научный сотрудник, доктор физико-математических наук **Рабинович Александр Львович** работает главным

научным сотрудником в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте биологии Карельского научного центра Российской академии наук (ФГБУН ИБ КарНЦ РАН).

*Официальные оппоненты:*

1. **Иванов Виктор Александрович**, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, доцент кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет» имени М. В. Ломоносова,

2. **Юрченко Антон Алексеевич**, гражданин Российской Федерации, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет»,

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

*Ведущая организация:*

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук**, г. Москва, в своем **положительном** заключении, подписанном ведущим научным сотрудником, д.ф.-м.н. *Савиным Александром Васильевичем* и старшим научным сотрудником, к.ф.-м.н. *Мазо Михаилом Абрамовичем* и утверждённым директором института, доктором химических наук, профессором *Берлиным Александром Александровичем*, указала, что «Диссертационная работа Д.В. Журкина “Свойства цепных молекул – компонентов мембранных систем. Компьютерное моделирование” является завершённым научно-квалифицированным исследованием», а также «полностью отвечает требованиям пункта 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней»

ВАК РФ при Минобрнауки РФ (утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г., № 842) предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук». Отзыв о диссертационной работе Журкина Д.В. представлен и обсужден на семинаре лаборатории физики и механики полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (руководитель семинара д.т.н., проф. Маневич Л.И.) 9 апреля 2015 г.

Соискатель имеет 27 опубликованных работ, из них по теме диссертации опубликовано 27 научных работ общим объёмом 5,2 печатных листов, в том числе 4 статьи в научных журналах и изданиях, которые включены в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций, 23 работы опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Рабинович, А. Л. Существенная выборка при моделировании непрерывного спектра конформаций макромолекул методом Монте-Карло / А. Л. Рабинович, Д. В. Журкин // Труды Карельского научного центра РАН. Сер. Математическое моделирование и информационные технологии. – 2013. – Вып. 4. – С. 96-111.

2. Журкин, Д. В. Оценка формы цепных углеводородных молекул методом Монте-Карло / Д. В. Журкин, А. Л. Рабинович // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. Естественные и технические науки. – 2014. – № 6 (143). – С. 109-117.

3. Журкин, Д. В. Изучение геометрических, термодинамических свойств и гибкости углеводородных молекул методом Монте-Карло / Д. В. Журкин, А. Л. Рабинович // Ученые записки Петрозаводского государственного университета. Сер. Естественные и технические науки. – 2014. – Т. 1, № 8 (145). – С. 96-103.

4. Журкин, Д. В. Свойства углеводородных цепей молекул фосфолипидов (метод Монте-Карло) / Д. В. Журкин, А. Л. Рабинович // Журнал физической химии. – 2015. – Т. 89, № 2. – С. 268-275.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Павла Николаевича Воронцова-Вельяминова**, доктора физико-математических наук, профессора физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет»;
2. **Волошина Владимира Петровича**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории молекулярной динамики и структуры Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук».
3. **Горюнова Андрея Сергеевича**, доцента, кандидата физико-математических наук, руководителя группы молекулярной биофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт биологии Карельского научного центра Российской академии наук» и **Рожкова Сергея Павловича**, доктора биологических наук, ведущего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт биологии Карельского научного центра Российской академии наук».
4. **Инги Александровны Роновой**, доктора химических наук, ведущего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук».
5. **Пестряева Евгения Михайловича**, кандидата физико-математических наук, доцента кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет».

*Замечания:*

- а). Возникает двоякое впечатление от образа действий автора. А именно: он взял хорошо апробированное силовое поле, но использовал его не в рамках молекулярной динамики с помощью также апробированных для этого алгоритмов, а разработал алгоритм для использования этого поля в

методе Монте-Карло. С одной стороны, всякое расширение возможностей существующих методов должно приветствоваться, с другой – обоснованность такого расширения в автореферате не просматривается.

б). На стр. 8 в последней строке читаем: «В разделе 2.5 *указан* метод атом-атомных потенциальных функций как способ расчета потенциальной энергии...». Либо слово «указан» означает как наиболее приемлемый способ с недосказанностью этой мысли, либо произошла подмена смысла.

Все отзывы, поступившие на диссертацию и автореферат, **положительные** (из них 1 отзыв с замечаниями, указанными выше) и заканчиваются выводом, что диссертационная работа Журкина Д.В. полностью соответствует требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор – Журкин Д.В. – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

*Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что:*

- **официальный оппонент д.ф.-м.н. Иванов В.А.** является одним из ведущих специалистов в области статистической физики цепных молекул и компьютерного моделирования полимерных и биополимерных систем, автор около 50 статей в отечественной и зарубежной печати. За последние пять лет им опубликовано 16 работ в центральных российских журналах и в зарубежных научных журналах с высоким импакт-фактором.

- **официальный оппонент к.ф.-м.н. Юрченко А.А.** является авторитетным специалистом в области моделирования полимерных цепей методом Монте-Карло, известен своими работами по энтропическому моделированию полиэлектролитов, незаряженных полимеров, полимерных звезд. За последние пять лет им было опубликовано 5 работ в ведущих российских и зарубежных научных журналах.

- ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук является одним из ведущих институтов Российской академии наук в области физики полимеров. Представители ведущей организации д.ф.-м.н. Савин Александр Васильевич и к.ф.-м.н. Мазо Михаил Абрамович имеют большое количество публикаций по компьютерному моделированию различных молекулярных объектов, в том числе полимерных молекул, они являются авторами отдельных глав в коллективной монографии «Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров», изданной в 2009 г. За последние 5 лет этими сотрудниками ведущей организации опубликовано 9 статей по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

*разработан* и реализован в компьютерной программе новый, оригинальный подход для имитации цепных молекул методом Монте-Карло. Используется существенная выборка конформаций молекул по энергии ближних взаимодействий, вычисленной с учетом непрерывного изменения торсионных углов во всем диапазоне (0 - 360 градусов) и взаимозависимости каждых трех из них вдоль цепи. Предложенный подход позволяет получить состоятельные оценки средних значений молекул в каноническом ансамбле;

*доказана* вычислительная эффективность разработанного алгоритма и с его помощью *получены* оценки равновесных свойств (средних размеров, параметров формы, гибкости) нескольких десятков углеводородных молекул, различающихся химическим строением (количеством атомов углерода, количеством двойных связей *cis*, их местоположением в цепи) в невозмущенном состоянии;

*установлены* устойчивые тенденции в зависимостях “структура - свойства” (качественно сохраняющиеся при изменении модели и силового поля) при сравнении рассчитанных данных с экспериментальными и теоретическими данными, имеющимися в литературе;

*изучены* ранее неизвестные связи и зависимости величин конформационной теплоемкости, относительных флуктуаций квадрата расстояния между концевыми атомами углерода, относительных флуктуаций квадрата радиуса инерции от параметров химического строения молекул;

*обнаружена* симбатность в изменениях гибкости углеводородных молекул и изменениях относительных флуктуаций квадрата расстояния между концевыми атомами углерода при изменении параметров химического строения молекул; *предложен* новый критерий для оценки гибкости молекул.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

*разработаны* математические алгоритмы, которые обладают общностью и обеспечивают возможность получения в рамках компьютерного моделирования методом Монте-Карло состоятельных оценок средних характеристик разных цепных молекул, в том числе ранее не изученных, важных для технологических процессов и/или природных систем;

*изучены* взаимосвязи между химическим строением ненасыщенных углеводородных цепных молекул и совокупностью их равновесных свойств, *дана интерпретация* этих взаимосвязей на основе фундаментальных данных об особенностях внутреннего вращения в молекулах данного класса;

*выявлены* такие тенденции, которые *устойчивы по направленности* изменений свойств молекул при изменении их строения;

*получен* ряд новых данных о свойствах олигомеров (конформационной теплоемкости, относительных флуктуаций квадрата расстояния между концевыми атомами углерода и др.);

*выявлены* причинно-следственные связи корреляций между гибкостью молекул и относительными флуктуациями квадрата расстояния между их концевыми атомами.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

*определена* степень применимости соотношений, полученных для углеводородных олигомерных цепей в невозмущенном состоянии, к этим же

цепям, являющимся компонентами молекул фосфолипидов в бислоях в жидкокристаллической фазе;

устойчивыми зависимостями “структура - свойства” *дополнена* база данных, которую можно использовать для интерпретации (1) различных физических свойств насыщенных и ненасыщенных углеводородных цепей, (2) экспериментальных данных по жирнокислотному составу липидов разных мембран и его изменению при изменении внешних условий;

*развиты* подходы для анализа процессов, происходящих в природных объектах при функционировании клеточных мембран, для углубленного понимания механизмов самоорганизации разных липидов с участием углеводородных цепей различной структуры, для разработки инновационных материалов для синтетических мембран.

#### **Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

*идея* предложенного математического алгоритма моделирования цепных молекул данного строения, генерирования их конформаций методом Монте-Карло опирается на базовые подходы компьютерного моделирования макромолекул;

*использованы* теоретические концепции, которые основаны на общих принципах классической статистической физики и теории вероятностей;

*разработаны* математические выражения для оценки средних значений, которые являются состоятельными;

*использованы* исходные данные микроструктуры молекул (входящие в состав параметров силового поля CHARMM27), согласующиеся с опубликованными экспериментальными данными;

*проведено* тестирование разработанного программного обеспечения и *получены* корректные результаты для известных предельных случаев;

*использованы* представительные выборочные совокупности конформаций молекул и достигнута надлежащая точность расчетных средних характеристик;

авторские результаты о свойствах молекул *согласуются* с теми экспериментальными данными и/или теоретическими результатами из



независимых литературных источников по данной тематике, сравнение с которыми является обоснованным.

**Личный вклад соискателя** состоит: в участии в разработке теоретической модели и математического алгоритма Монте-Карло для имитации конформационного поведения цепных молекул; в создании компьютерной программы, реализующей данный алгоритм; в проведении моделирования на кластере всех рассмотренных молекул с помощью разработанной программы; в обработке рассчитанных данных; в участии в интерпретации результатов и подготовке основных публикаций по выполненной работе.

Научные публикации и автореферат полностью отражают содержание диссертации и результаты, полученные в работе.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается непротиворечивостью использованных теоретических концепций, согласованием развитых подходов с общими принципами статистической физики и парадигмой данной области науки, наличием корреляции рассчитанных характеристик молекул между собой и их взаимным дополнением, согласованностью и взаимосвязанностью выводов.

Диссертационный совет Д 212.190.06 на заседании *10 июня 2015 г.*, протокол №9 пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, и принял решение присудить **Журкину Дмитрию Викторовичу** ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 (шестнадцать) человек, из них 10 (десять) докторов наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании и голосовании, из 22 (двадцати двух) человек, входящих в состав совета, проголосовали:  
за – 16 (шестнадцать), против – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Председатель  
диссертационного совета

Гуртов В. А.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Пикулев В. Б.

10 июня 2015 г.

Подпись руки	<u>Гуртов В. А.</u>
	<u>Пикулев В. Б.</u>
УДОСТОВЕРЯЮ.	
Уч. секретарь ученого совета	<u>Бутило А. И.</u>
	<u>« 11 » июня 2015 г.</u>