

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Журкина Дмитрия Викторовича
«СВОЙСТВА ЦЕПНЫХ МОЛЕКУЛ – КОМПОНЕНТОВ МЕМБРАННЫХ
СИСТЕМ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Представленная диссертация посвящена компьютерному моделированию цепных молекул с учетом широкого диапазона их конформаций и изучению свойств полученных модельных цепей. В ходе выполнения работы был разработан универсальный подход для представления молекул заранее заданного химического строения, разработан обобщенный алгоритм для проведения компьютерных экспериментов методом Монте-Карло (МК) с этими молекулами в условиях раствора и невозмущенного состояния. Для преимущественного учета наиболее вероятных конформаций при их генерировании был предложен способ их эффективной выборки «по важности», – по энергии ближних межатомных взаимодействий.

Актуальность представленной работы связана с трудностями описания в ходе моделирования (например, методом молекулярной динамики) конфигурационного пространства сложной биологической системы, - такой как биомембрана. Время релаксации таких систем составляет миллисекунды и даже секунды, тогда как максимальная длительность модельных траекторий, доступных для расчёта в настоящее время, не превышает нескольких микросекунд. Для более адекватного моделирования приходится запускать множество независимых процессов, для которых стартовые конфигурации должны быть расположены в конфигурационном пространстве вблизи точек с наибольшей вероятностью реализации. Предложенный в диссертации алгоритм МК-моделирования позволяет найти за приемлемое время свойства наиболее типичных молекулярных компонентов биомембраны; эти компоненты определяют свойства отдельных ее кластеров. Тем самым можно получить прогноз искомым свойствам в мембране и подготовить почву для

последующего более точного моделирования уже с использованием всех параметров и всех взаимодействий для конкретного поля сил.

Представленный в диссертации алгоритм является уникальной разработкой диссертанта и его соавторов. Достоверность полученных с его помощью результатов подтверждена корреляцией средних значений характеристик цепных молекул с имеющимися литературными данными.

Автореферат написан ясным языком, квалифицированно и аккуратно оформлен. Он содержит достаточное количество исходных данных, имеет пояснения, рисунки, графики, достаточно полно отражает содержание диссертации. Замечаний по содержанию и оформлению автореферата нет. Результаты исследований опубликованы в 4-х статьях журналов из списка, рекомендованного ВАК при Минобрнауки России. Исходя из содержания автореферата, диссертация написана на высоком научном уровне, соответствует требованиям п.9 “Положения о присуждении ученых степеней” ВАК (утвержденного постановлением № 842 Правительства России от 24 сентября 2013 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соискатель Журкин Дмитрий Викторович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Волошин Владимир Петрович,
к.ф.-м.н., снс лаборатории молекулярной
динамики и структуры.
Институт химической кинетики и горения
им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск

Адрес: 630090, г.Новосибирск, ул. Институтская, 3,
Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН
E-mail: voloshin@kinetics.nsc.ru
Тел.: +7(383) 333-28-54

Подпись Волошина В.П. заверяю.
Зав. канцелярией Зибарева Т.И.

