

О Т З Ы В

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

Основу мембран природного происхождения образуют молекулы фосфолипидов, в состав которых входят углеводородные цепи. Наибольший охват вариантов их строения достигнут в литературе лишь в рамках одной модели компьютерного моделирования методом Монте-Карло (МК). Поэтому представляет интерес разработка универсальных моделей, пригодных для реалистического описания соответствующих цепных молекул и систем. В этой связи диссертационная работа Д. В. Журкина является весьма актуальной.

В первой главе диссертации описана методология разделения энергии цепной молекулы на энергию ближних и дальних взаимодействий, подчеркнуто, что количество и местоположение двойных связей в цепи оказывает влияние на все свойства молекул. Во второй главе представлен разработанный автором алгоритм МК. В частности, обсуждены выражения для среднего значения любой макроскопической наблюдаемой величины системы частиц в разных переменных; варианты статистического описания цепных молекул. Рассмотрены “жесткая” и “гибкая” модели и обосновано использование автором “гибкой модели с предельно упругими валентными углами и связями”. Третья глава посвящена описанию результатов расчетов свойств углеводородных цепных молекул с двойными связями в невозмущенном состоянии.

Хотелось бы отметить оригинальность замены схемы вычисления энергии в рамках попарной корреляции торсионных углов на схему взаимозависимости 3-х последовательных углов, которая способствует выявлению тенденций в зависимостях “структура - свойства”.

Значительный интерес представляет установленная диссертантом конкурентность влияния параметров (количество N атомов углерода, d -двойных связей, их местоположение- X), определяющих микроструктуру неразветвленной углеводородной олигомерной цепи на любые ее средние геометрические или термодинамические характеристики. Показано, что при некоторых сочетаниях параметров возможен компенсационный эффект: существуют совокупности молекул, различающихся по строению, но обладающих близкими значениями той или иной средней характеристики. Невозмущенные олигомерные цепи с одинаковыми N и d характеризуются почти одинаковыми средними величинами удельной конформационной теплоемкости. При этом удельная теплоемкость почти не зависит от местоположения X двойных связей в цепи. Таким образом, диссертантом, фактически, установлено физическое проявление взаимосвязи структурных параметров, которое, возможно, определяется вложением структуры цепи в некую высокосимметричную конструкцию.

Исходя из представленных в автореферате сведений, рассматриваемая диссертационная работа является законченным научным исследованием и отвечает требованиям пункта 9 “Положения о присуждении ученых степеней” ВАК при Минобрнауки РФ, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Журкин Дмитрий Викторович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник. Института элементоорганических соединений им А.Н. Несмеянова РАН доктор химических наук Инга Александровна Ронова 119991 Москва, ул. Вавилова 28, ron@ineos.ac.ru, (499)135-80-35

И.А. Ронова

**ПОДПИСЬ
УДОСТОВЕРЯЮ
ОТДЕЛ КАДРОВ ИНЭОС РАН**



И.А. Ронова