

## ОТЗЫВ

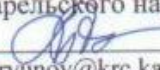
на автореферат диссертации Журкина Дмитрия Викторовича на тему: «Свойства цепных молекул – компонентов мембранных систем. Компьютерное моделирование», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационное исследование, выполненное Журкиным Дмитрием Викторовичем, затрагивает актуальную на сегодняшнее время тему – изучение методами компьютерного моделирования - статистических испытаний и молекулярной динамики - равновесных и динамических физических свойств молекул цепного строения, в том числе составляющих основу мембран живых клеток фосфолипидов, которые отличаются как длиной цепи, так и количеством, конфигурацией и позицией двойных связей.

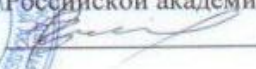
Важными результатами работы Журкина Д.В., является то, что им построена модель и реализован в программах математический алгоритм генерирования конформаций цепных молекул произвольного строения методом Монте-Карло с использованием существенной выборки по энергиям ближних взаимодействий; выявлены основные устойчивые тенденции в зависимостях структура-свойства, установлены корреляции в изменениях разных характеристик цепных молекул. Считаем также важным отметить, что для расчета свойств цепных молекул часто применяется поворотнo-изомерная модель, в которой используются только дискретные состояния, отвечающие положениям минимумов энергии. В отсутствие выраженных, симметричных минимумов энергии, использование поворотнo-изомерного приближения затруднено, поскольку открытым остается вопрос о выборе значений параметров. При использовании в диссертационной работе Журкина Д.В. непрерывного спектра конформаций учитывается асимметрия заселенности состояний. Это позволяет более адекватно моделировать макромолекулы заданной структуры, обеспечивает более широкие возможности в описании их характеристик в разных условиях, а также предсказании свойств в тех случаях, когда экспериментальные данные отсутствуют. Это создает основу для более корректного рассмотрения ряда эффектов, в частности, тех, в которых большое значение имеет "накопление" вдоль по цепи небольших отклонений углов внутреннего вращения от поворотнo-изомерных состояний. Таким образом, преимущества использования непрерывного спектра конформаций цепных молекул в теоретических моделях и целесообразность разработки настоящего алгоритма несомненны.

Это определяет высокий общий научный уровень диссертационной работы, а полученные важные результаты дают основание для положительной оценки диссертационного исследования.

Таким образом, Журкин Д.В. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Руководитель группы молекулярной биофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биологии Карельского научного центра Российской академии наук, к.ф.-м.н., доцент  
  
Горюнов Андрей Сергеевич  
gorjunov@krc.karelia.ru 185610 Петрозаводск, ул.Пушкинская, 11

Ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биологии Карельского научного центра Российской академии наук, д.б.н.

  
Рожков Сергей Павлович



Подпись *Горюнов А.С., Рожков С.П.*  
удостоверяю секретарь директора  
ИБ КарНЦ РАН  
 Е.М. Фокина  
24, апреля 2015 г.