

О Т З Ы В

на автореферат диссертации **Д.В. ЖУРКИНА**

“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

Методы компьютерного эксперимента играют в настоящее время существенную роль в исследованиях широкого круга конденсированных систем. Одной из наиболее актуальных областей применения компьютерного моделирования является изучение полимерных систем различной структуры и организации, поскольку полимеры, как правило, слишком сложны для их адекватного описания в рамках аналитических теорий. Работа **Д.В. Журкина**, посвященная исследованию равновесных и динамических свойств цепных молекул при наличии двойных связей с использованием методов Монте-Карло и молекулярной динамики, безусловно, является актуальной.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и включает девять приложений. Следует отметить большой объем работы - 198 страниц, в том числе 76 рисунков, 3 схемы и 10 таблиц - (плюс приложения, занимающие 37 страниц, в том числе 18 рисунков и 8 таблиц). Список литературы содержит 248 наименований.

Обзорная **глава 1** включает 5 разделов. Первый раздел посвящен описанию строения углеводородных цепных молекул, второй раздел – их свойствам. Рассмотрена методология разделения энергии цепной молекулы на энергию ближних и дальних взаимодействий, приведены данные о свойствах цепей в кристаллическом состоянии, о температуре плавления, конформационной теплоемкости, форме различных молекул, их равновесной гибкости. В разделе 1.3 говорится о плавлении молекул конкретных полимеров – фосфатидилхолинов – с цепями разной степени ненасыщенности, подчеркнута, что число и положение двойных связей в цепи оказывает важное влияние на свойства молекул. В разделе 1.4 дана общая характеристика литературных данных, выделены актуальные вопросы области в целом и настоящей работы, в частности. Цели и задачи работы сформулированы в пятом разделе.

Результаты исследования содержатся в **главах 2, 3** диссертации.

Вторая глава содержит 8 разделов и посвящена рассмотрению использованного в работе МК-алгоритма. Обсуждаются варианты описания цепных молекул в рамках классической статистической механики, рассмотрены как жесткая модель, так и гибкая модель в нескольких вариантах. Автором использована “гибкая модель с предельно упругими валентными углами и связями”. Приведено выражение для средней энергии цепной молекулы в NVT -ансамбле в рамках классической гибкой модели. Для расчета потенциальной энергии цепных

молекул использован метод атом-атомных потенциальных функций, численные значения всех параметров модифицированного варианта поля CHARMM27 даны в Приложении 1. Предложен алгоритм описания строения молекулы (типы атомов, равновесные длины валентных связей, величины валентных углов, парциальные заряды на атомах). При генерировании ее конформаций на компьютере все ее параметры задаются в виде совокупностей матриц, использование предложенного алгоритма описано в Приложении 2. Приводится детальное описание методики конструирования как начальных конформаций цепей, так и их модификации в процессе моделирования.

В третьей главе приведены результаты расчетов свойств углеводородных цепных молекул с двойными связями. Глава содержит введение и 7 разделов. Во введении кратко описана совокупность изученных молекул и их параметры – количество атомов углерода в цепях (16, 18, 20, 22), число двойных связей (0, 1, 2, ..., 6), положения двойных связей в цепи и ряд других. Построены зависимости свойств (средних характеристик) систем от каждого из параметров молекул при фиксировании других (Приложение 8). Технология параллельных вычислений описана в Приложении 9. Длина использованных МК-цепей обеспечила высокую точность и надежность результатов. Проведен анализ совокупности полученных данных и установлено хорошее соответствие результатов диссертации с данными, как натуральных физических экспериментов, так и компьютерного моделирования, проведенного другими авторами.

Материал в автореферате изложен четко. Работа представляет собой интересное, очень тщательное и полезное исследование и достойна высокой оценки. Представляется, что ее автор, **Д.В. ЖУРКИН**, несомненно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07.

Результаты диссертации отражены в 4 статьях в журналах из списка ВАК, а также и в других публикациях, приведенных в автореферате, они докладывались на 21 Всероссийский и Международных научных конференциях.

*Павел Николаевич Воронцов-Вельяминов, 198504 С-Петербург,
Петродворец, ул. Ульяновская 1. Физфака СПбГУ, (812) 4284035
vovon.wv@mail.ru*

Доктор физ.-мат. наук
профессор физического
факультета СПбГУ



/ П.Н. Воронцов-Вельяминов /

27.05.2015.

ПОДПИСЬ РУКИ
ЗАВЕРЯЮ. НАЧАЛЬНИК
ОТДЕЛА КАДРОВ
Н.А. ГОРИШИН



П.Н. Воронцов-Вельяминов