

**РЕЦЕНЗИЯ** на выпускную квалификационную работу обучающегося в  
СПбГУ

*Бойко Оксаны Сергеевны*

по теме «Моделирование полиаспарагиновой кислоты в водных растворах  
минеральных солей»

Бакалаврская работа О.С. Бойко посвящена исследованию влияния ионов кальция на конформацию поли- $\alpha$ -L-аспарагиновой кислоты. Используя метод полноатомной молекулярной динамики, автор выполнила серию моделирований депротонированной поли- $\alpha$ -L-аспарагиновой кислоты в водных растворах хлорида кальция.

Одним из достоинств работы О.С. Бойко является структурированный литературный обзор и четкая постановка цели и задач работы. О.С. Бойко был проведен подробный анализ как существующих экспериментальных работ, так и работ, посвященных атомистическому моделированию полиэлектролитов в растворах минеральных солей. В результате проведенного анализа, обосновано использование метода молекулярной динамики и силового поля Charmm 27 для решения поставленных задач. Описание процедуры моделирования подробно и позволяет повторить проведенный компьютерный эксперимент.

В результате проделанной работы О.С. Бойко были получены зависимости радиуса инерции, распределения углов внутреннего вращения основной цепи, а также количества адсорбированных ионов на полимере от концентрации соли в системе.

О.С. Бойко была получена зависимость радиуса инерции от концентрации хлорида кальция в системе. Несмотря на сильные флуктуации радиуса инерции при высоких концентрациях, связанные, скорее всего, со слишком коротким временем моделирования, изменения радиуса инерции при низких концентрациях согласуются с результатами работ других авторов. Время моделирования, достигнутое в данной работе (300 нс для отдельной системы) больше времен моделирования в аналогичных работах

других авторов, но тем не менее, для получения более аккуратных результатов требуется большее время моделирования. Однако, возможно требуется дополнительное исследование того, как изменяются результаты работы при увеличении времени моделирования.

Интересным является результат работы, связанный с появлением на распределении углов внутреннего вращения основной цепи в результате адсорбции ионов кальция новой области, отвечающей структуре левозакрученной  $\alpha$ -спирали. Тем не менее, работа выглядела бы более законченной с оценкой длины регулярных участков с одинаковым распределением углов.

Данные замечания, не влияют на общую ценность работы и несут лишь рекомендательный характер. Оксана Сергеевна Бойко продемонстрировала владение современными методами компьютерного моделирования. Объем и качество проделанной работы соответствует уровню бакалаврской работы. Работа заслуживает оценки отлично, а О.С. Бойко присуждения ей степени бакалавра по направлению «Физика».

19 мая 2017 года

Научный сотрудник  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Института высокомолекулярных соединений  
Российской академии наук,  
кандидат физ.-мат. наук



Виктор Михайлович  
Назарычев

