

ОТЗЫВ
на автореферат диссертации Буглака Андрея Андреевича
«ФОТОБИОХИМИЯ ПТЕРИНОВЫХ КОФЕРМЕНТОВ»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 03.01.04 – Биохимия

Работа Буглака Андрея Андреевича посвящена исследованию фотобиохимии птериновых коферментов, в частности тетрагидробиоптерина и его окисленных производных. Восстановленные формы птеринов участвуют в качестве редокс-агентов в катализических реакциях восстановления, а высокий потенциал ионизации окисленных форм птеринов, напротив, позволяет им участвовать в реакциях окисления и, в частности, в реакциях фотосенсибилизированного окисления. Возможность участия птеринов в реакциях фотосенсибилизированного окисления экспериментально исследована на примере реакции между биоптерином и 5,6,7,8-тетрагидробиоптерином.

Диссидентом предложен и исследован новый способ предсказания квантового выхода генерации синглетного кислорода птериновых и flavиновых сенсибилизаторов на основе данных конформационного анализа, квантово-химических расчетов и QSPR. Кроме того, с помощью теоретических методов оценена возможность генерации супероксид-анион радикала данной группой сенсибилизаторов. Полученные данные согласуются с экспериментальными данными литературы.

Следует отметить, что автором получен ряд важных результатов, касающихся фотохимии восстановленных форм птеринов. Так, Буглаком А.А. на основе теоретических расчетов предсказана возможность быстрой внутренней конверсии возбужденного состояния данных соединений, а также показано сходство данного процесса с внутренней конверсией гуанина. Также, Буглаком А.А. предложена гипотеза, объясняющая роль восстановленных птеринов в рецепции ультрафиолета живыми организмами.

Практическая значимость работы заключается в том, что автором сделана попытка осветить один из аспектов этиологии заболевания витилиго. Диссидентом предложена схема, показывающая связь реакций фотосенсибилизированного окисления кофермента 5,6,7,8-тетрагидробиоптерина с реакциями начальных стадий меланогенеза. Также стоит отметить существенное практическое значение полученных автором QSPR уравнений, предсказывающих величину квантового выхода генерации синглетного кислорода.

Диссертационная работа выполнена с использованием современных квантово-химических методов: теории функционала плотности (функционал Беке-Ли-Янга-Парра B3LYP), самосогласованного поля в варианте полного активного пространства (CASSCF), а также ряда полуэмпирических методов. Применение данных методов было адекватно для решения поставленных автором задач. Достоверность полученных результатов не вызывает сомнения.

Большой объем проделанной работы, ее актуальность, соответствие использованных теоретических и экспериментальных методов поставленным задачам, теоретическая и практическая значимость позволяют заключить, что работа Буглака Андрея Андреевича представляет собой законченную научно-квалификационную работу и удовлетворяет всем критериям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Буглак Андрей Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 03.01.04 – биохимия.

Фрейдзон Александра Яковлевна, к.х.н.,
научный сотрудник лаборатории квантовой химии и молекулярного
моделирования

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук» (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН)
e-mail: sanya@photonics.ru

Проф. Багатурьянц Александр Александрович, д.х.н.,
Главный научный сотрудник
лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования
Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-
исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии
наук» (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН)
e-mail: sasha@photonics.ru

119421 г. Москва, ул. Новаторов д. 7а, корп.1
телефон (495)936-77-53

25.08.2016

подпись Багатурческая А.А.
заверяю: Земсковец О.

A circular stamp with the following text:

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ПОДОЛОСТИ»
ФГУП «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ПОДОЛОСТИ»
ОГДР

ell. Seewerfer

подпись Фрейдзон А.Я.
заверяю: Заслуженный