

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертационной работы Буглака Андрея Андреевича

«Фотобиохимия птериновых коферментов»,

представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук

(специальность 03.01.04 – Биохимия)

Диссертационная работа представляет собой комбинированное теоретическое и экспериментальное исследование свойств птериновых коферментов. Эти соединения выполняют разнообразные функции в живых организмах, в частности, являются фотогенераторами синглетного кислорода, что подробно обсуждается в данной работе. В этой связи исследование, проведенное автором, безусловно, **актуально**.

В ходе выполнения работы автором использованы различные теоретические подходы: метод молекулярной механики, полуэмпирический метод AM1, метод функционала электронной плотности и многоконфигурационный метод самосогласованного поля в полном пространстве активных орбиталей (CASSCF). Автором рассчитаны вертикальные энергии электронных переходов и проведено сканирование поверхности потенциальной энергии основного и возбужденного состояний 5,6,7,8-тетрагидро-6-гидрокси-метилптерина, проведен конформационный анализ нейтральной молекулы и катион-радикала 5,6,7,8-тетрагидро-6-гидрокси-метилптерина, а также рассчитан ряд энергетических характеристик шести птериновых соединений. Несомненным достоинством работы является применение наряду с теоретическими расчетами экспериментальных методов исследования: ВЭЖХ, масс-спектрометрии, спектрофотометрии, флуориметрии и других. Таким образом, автором использован широкий спектр современных методов. Полученные данные адекватно проанализированы, приведены необходимые пояснения, что позволяет не сомневаться в **достоверности** полученных результатов и выводов.

Диссертантом получены следующие результаты, несомненно, представляющие интерес:

1. Установлены продукты фотоокисления кофермента 5,6,7,8-тетрагидробиоптерина в водном растворе.
2. Показана возможность фотосенсибилизированного окисления 5,6,7,8-тетрагидробиоптерина продуктами его деградации и предложен механизм этого процесса.
3. С помощью квантово-химических расчетов показана возможность быстрой внутренней конверсии возбужденных состояний тетрагидровосстановленных птеринов.

4. Построен ряд QSPR моделей, позволяющих проводить виртуальный скрининг и предсказание квантового выхода генерации синглетного кислорода птеридинами.

Перспективность использования птеринов в качестве фотодинамических агентов, в купе с возможностью виртуального скрининга их фотохимической активности свидетельствует о **практической значимости** работы.

В качестве замечания можно отметить, что при построении QSPR моделей в качестве одного из дескрипторов используется энергия НОМО орбитали, что обосновывается теоремой Купманса. Однако по теореме Купманса предполагается использование энергий молекулярных орбиталей, полученных в методе Хартри-Фока, в то время как из текста автореферата следует, что орбитальная энергия взята из метода функционала электронной плотности, не предполагающего наличие физического смысла орбитальных энергий.

Тем не менее, указанное замечание не умаляет достоинств и не снижает качества диссертационной работы.

По актуальности исследования, объему материала и значимости полученных результатов диссертационная работа Буглака А.А. соответствует всем требованиям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842, и другим требованиям ВАК РФ, и её автор Буглак Андрей Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 03.01.04 – Биохимия.

Ведущий научный сотрудник,
кандидат физико-математических наук
(02.00.17 математическая и квантовая химия)

Хренова Мария Григорьевна

Федеральное государственное бюджетное
Образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»,
химический факультет, кафедра физической химии
Ленинские горы, 1-3, 119991 Москва, РФ
Тел: +79261812997
Email: mkhrenova@lcc.chem.msu.ru

22.09.2016

Личную подпись
ЗАВЕРЯЮ:
Нач. отдела делопроизводства
химического факультета МГУ

Ларионова
1955