

ОТЗЫВ

научного руководителя
на диссертацию Ильичевой Полины Михайловны
«Физико-химические основы и полноатомное моделирование формирования
импринтированного альбумина»,
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. «Физическая химия»

Ильичева (Соболева) Полина Михайловна в 2020 году окончила бакалавриат по направлению 04.03.01 «Химия», в 2022 году – магистратуру по направлению 04.04.01 «Химия» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского». В 2022 году Ильичева П.М. была зачислена в аспирантуру ФГБОУ ВО СГУ, научное исследование по диссертационной тематике выполнял на кафедре общей и неорганической химии.

Диссертационная работа Ильичевой П.М. представляет собой актуальное фундаментальное исследование, направленное на решение важной задачи — разработке физико-химических основ и полноатомному моделированию формирования импринтированного белка (бычьего сывороточного альбумина, БСА) с возможностью прогнозирования сорбционных свойств.

В рамках работы проведено комплексное исследование влияния рН среды на конформационную динамику БСА, определены количественные термодинамические параметры взаимодействия белковой матрицы с модельной молекулой-шаблоном (4-гидроксикумарином), детально изучен процесс формирования ассоциата и разработан подход к полноатомному моделированию его структуры на ключевых этапах импринтинга.

Ильичевой П.М. проведена систематическая работа по установлению критериев выбора оптимальных условий получения импринтированных белков (ИБ). Комплексом современных экспериментальных и вычислительных методов детально изучено влияние рН среды на электрокинетические, гидродинамические и спектральные характеристики БСА. Особое внимание уделено исследованию системы в условиях получения ИБ (рН 3,0 и рН 9,0). Установлено, что использование кислых условий на начальном этапе импринтинга позволяет повысить сорбционные характеристики (степень извлечения) ИБ за счет обеспечения полной заселенности сайтов связывания и улучшения их геометрической комплементарности. На основе сопоставления рассчитанного числа сайтов связывания и экспериментальных значений степени извлечения сформулирована гипотеза об оптимальном молярном соотношении компонентов при получении ИБ. Прогностическая способность разработанного подхода верифицирована на расширенной выборке низкомолекулярных соединений различной природы ($n = 7$), что позволяет исключить эмпирический подбор условий.

В ходе проведенного исследования Ильичевой П.М. был выполнен обширный и глубокий литературный обзор, посвященный современным достижениям в области получения ИБ. Автором продемонстрировано свободное

владение материалом, способность к систематизации и критическому анализу данных о механизмах межмолекулярных взаимодействий в системах белок–лиганд и методах оценки их сродства. Высокая эрудиция автора позволила обосновать перспективность интеграции алгоритмов компьютерного моделирования в практику рациональной разработки биорецепторных материалов на основе ИБ. Результаты проведенного исследования свидетельствуют о высоком уровне подготовки.

Работа отличается полнотой охвата материала, логической последовательностью и ясностью изложения. Результаты проведенного исследования свидетельствуют о высоком уровне теоретической подготовки Ильичевой П.М. и ее готовности к самостоятельной научной деятельности.

Ильичева П.М. зарекомендовала себя как вдумчивый, самостоятельный и квалифицированный исследователь, владеющий современными методами исследований, способный самостоятельно ставить актуальные научные задачи, грамотно планировать и проводить экспериментальные и масштабные вычислительные исследования, интерпретировать и систематизировать полученные результаты, формулировать выводы. Ильичева П.М. проявляет постоянный интерес к междисциплинарным направлениям науки, выходящим за рамки непосредственной темы диссертационной работы. Наряду с исследовательской деятельностью, Ильичева П.М. активно участвовала в научно-педагогической работе кафедры, осуществляя со-руководство и научно-методическое консультирование студентов при выполнении курсовых и выпускных квалификационных работ бакалавров и магистров Института химии в период с 2022 по 2026 гг.

Финансовая поддержка работы осуществлялась в рамках грантов Российского научного фонда «Высокоselectивные сорбенты на основе молекулярно импринтированных полимеров для решения задач животноводства и растениеводства» (№ 22-16-00102), «Импринтированные белки — рецепторные элементы для определения и концентрирования цианотоксинов в водных объектах» (№ 24-73-00250). По материалам диссертационной работы Ильичевой П.М. опубликовано 9 статей, входящих в перечень ВАК, и библиографические базы данных Web of Science и Scopus (Polymers, Biosensors, Analytical and Bioanalytical Chemistry, Russian Journal of General Chemistry, Journal of Chemometrics, Molecular Systems Design & Engineering, Microchimica Acta, Журнал аналитической химии, Известия Саратовского университета. Серия Физика).

Работа апробирована на научных конференциях различного уровня, из которых хотелось бы отметить: The 14th Winter Symposium on Chemometrics (Цахкадзор, Армения, 2024), XIII International Conference on Chemistry for Young Scientists “Mendeleev 2024” (Санкт-Петербург, Россия, 2024), XXIX Symposium “Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery” (Москва, Россия, 2023).

Диссертационная работа Ильичевой П.М. является завершенным систематическим исследованием, выполненным на высоком экспериментальном и теоретическом уровне. Содержание работы соответствует паспорту

специальности 1.4.4. Физическая химия в части пунктов 1, 3, 4, 11, 12. Работа аккуратно оформлена, тщательно выверена, иллюстрирована графиками, схемами, микрофотографиями и таблицами. Принципиальных замечаний по работе нет.

Считаю, что диссертационная работа Ильичевой Полины Михайловны «Физико-химические основы и полноатомное моделирование формирования импринтированного альбумина» полностью отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор диссертационного исследования заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Научный руководитель



Н.А. Бурмистрова

14.09.2020

Бурмистрова Наталия Анатольевна, доктор химических наук, доцент, профессор кафедры общей и неорганической химии Института химии ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

410012, Саратов, ул. Астраханская, 83, СГУ, 1 корпус, Институт химии СГУ

Тел. +7 (8452) 51-69-53

E-mail: naburmistrova@mail.ru

