

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Рабдано Севастьяна Олеговича «Развитие методов ЯМР для исследования состояния биологических молекул в условиях окислительно-восстановительных процессов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – «Физика магнитных явлений»

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) является мощным и общепризнанным методом исследования веществ на всех уровнях: от молекулярного до макроскопического. Однако, и это вполне естественно, что современные исследования требуют дальнейшего совершенствования теории и практики ЯМР.

Научная новизна работы заключается в разработке нового подхода к совместному анализу данных ЯМР релаксации и квантово-химических расчетов, который в итоге позволил описать водное окружение органических молекул в виде системы, в которую входят гидратные оболочки отдельных гидрофильных и гидрофобных молекулярных групп.

Диссертационная работа С.О. Рабдано является актуальной и представляет собой развитие методов ЯМР в нескольких направлениях:

1. Предлагается ряд новых подходов ЯМР-спектроскопии для исследования белков в агрегированном состоянии, позволяющих с помощью наблюдения спектров глобулярной формы белка сделать выводы о степени разупорядочивания пептидных цепей в агрегированном состоянии.
2. Предложен метод, основанный на совместной интерпретации данных ЯМР и динамического рассеяния света, для определения параметров распределения частиц по размерам в полидисперсной системе агрегатных частиц.
3. Рассмотрение магнитной релаксации дейтронов в гидратной оболочке аминокислот как суперпозиции вкладов от гидратных оболочек отдельных молекулярных групп и квантово-химические расчеты водного окружения сделали возможным определение характерных времен переориентационного движения молекул воды в этих гидратных оболочках.
4. Измерения ЯМР релаксации ^{15}N в нативно разупорядоченных белках были проанализированы совместно с данными моделирования молекулярной динамики (МД), что позволило выявить основные моды молекулярного движения, ответственные за процесс ЯМР-релаксации в подобных системах.

Поставленные соискателем конкретные задачи являются обоснованными для достижения основной цели работы – разработки методик ЯМР для изучения

биологических молекул в состояниях, не позволяющих прямого наблюдения с помощью спектроскопии ядерного магнитного резонанса.

Эти задачи успешно решаются в работе. В автореферате хорошо изложены основные результаты, полученные при выполнении исследований. Оформление автореферата выполнено в соответствии с требованиями ВАК.

К недостаткам текста автореферата можно отнести отдельные стилистические неточности, и, в некоторых случаях, весьма запутанную манеру описания рисунков (например, рис. 3 имеет излишне много информации, которую логичнее было бы привести в тексте). Также в автореферате зачастую не раскрываются сокращения (например МД, Н/Д обмен и др.). Текст автореферата изобилует "жаргонными" выражениями, являющимися общепринятыми в узком кругу специалистов в области ЯМР высокого разрешения. Однако эти недостатки не принципиальны и не влияют на общую высокую оценку диссертации.

Результаты работы хорошо опубликованы в рецензируемых научных журналах (6 публикаций) и докладывались на большом количестве профильных конференций по соответствующей специальности, а также опубликованы в авторитетных международных журналах. Из содержания автореферата можно сделать вывод, что диссертация Рабдано Севастьян Олеговича по объему выполненного исследования, научной и практической значимости соответствует квалификационным требованиям к кандидатским диссертациям, которые сформулированы в пп. 9-14 Положения ВАК о присуждении учёных степеней (утверждённым постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 в редакции, утвержденной постановлением Правительства РФ № 335 от 21.04.2016 г. «О внесении изменений в положение о присуждении ученых степеней»), а ее автор заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.11 – «Физика магнитных явлений».

Зав. кафедрой квантовой электроники и радиоспектроскопии

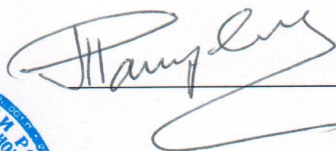
Института Физики Казанского (Приволжского) федерального университета,

д.ф.-м.н. (01.04.07), член-корр. АНРТ, профессор

420008, г. Казань, ул. Кремлевская 18, КФУ

тел: (843)-233-73-55

e-mail: murat.tagirov@gmail.com



Тагиров Мурат Салихович

Подпись Тагирова Мурата Салиховича заверяю _____ (_____)

17.05.2018

