

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Щугоревой Ирины Андреевны
«**Моделирование структуры и свойств синтетических олигомеров методами
теории функционала плотности**»,
представленной к защите на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика
конденсированного состояния

Диссертационная работа Щугоревой Ирины Андреевны посвящена изучению структуры и физических свойств органических макромолекул с помощью квантовохимических и молекулярнодинамических методов. В работе в первую очередь исследуются аптамеры – химические аналоги антител, обладающие рядом преимуществ и способные с высокой специфичностью, и селективностью связываться с разнообразными молекулярными мишенями. Выбор объектов исследования подтверждают актуальность и значимость работы.

В рамках диссертационных исследований для ряда аптамеров определена атомная структура в растворе при нормальных условиях, а для аптамера Gli-55 предложена модификация, сохраняющая и улучшающая его свойства связывания. Выполнено моделирование структурных и оптических свойств сопряженных полимеров, сополифлуоренов и показана возможность управления смещением пика поглощения путем добавления заместителей в основную цепь полимера. Для верификации и дополнения полученных результатов были использованы данные из ряда экспериментов, а именно из УФ-спектроскопии, кругового дихроизма, малоуглового рентгеновского рассеяния и проточной цитометрии. Данный междисциплинарный подход позволяет судить о достоверности полученных в работе результатов. Показано, что исследуемые в работе соединения являются перспективными для создания биосенсоров на их основе. Совокупность представленных в диссертации научных результатов, указывает на целостность работы и общую идею проводимых исследований, конечная цель которых носит прикладной характер.

Достоверность результатов и личный вклад автора не вызывают сомнений. Результаты диссертационного исследования опубликованы в пяти журналах, индексируемых в признанных международных базах и апробированы на нескольких международных и российских конференциях. Практическая значимость работы подтверждена Патентом РФ.

Замечания по автореферату:

1) В тексте автореферата ни для одной из пространственных моделей аптамера Gli-55 не проиллюстрированы соответствующие вторичные структуры.

2) В автореферате отсутствует информация об условиях (концентрация ионов, температура) для моделирования вторичных структур для ряда аптамеров Gli-233 и Apt-31.

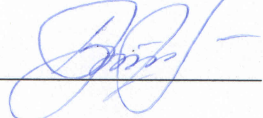
3) Текст автореферата содержит ряд синтаксических и пунктуационных ошибок. Например, «использование малоуглового рассеяния рентгеновского лучей» (стр. 9), «коллегами лаборатории» (стр. 14).

Указанные замечания не снижают общее положительное впечатление от работы.

Считаю, что по своей актуальности, новизне, научной и практической значимости работа Щугоревой Ирины Андреевны «Моделирование структуры и

свойств синтетических олигомеров методами теории функционала плотности» является полноценной научно-квалификационной работой. Диссертация полностью соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям в соответствии с п. 7 «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Заведующий Иркутским филиалом
ФГБУН Института лазерной физики СО РАН
Доктор физико-математических наук, доцент
шифр специальности, по которой защищена диссертация
01.04.07 – Физика конденсированного состояния


08.09.2023 г.  Дресвянский Владимир Петрович

664033 г. Иркутск ул. Лермонтова 130А, п/я № 281,
Иркутский филиал ФГБУН ИЛФ СО РАН
E-mail: ibchief@ilph.irk.ru, тел: 8-(3952)-51-14-38

Подпись Дресвянского Владимира Петровича заверяю:

Ученый секретарь ИФ ИЛФ СО РАН



 А.В. Кузнецов