

ОТЗЫВ

научного руководителя о работе Капусты Дмитрия Павловича
«Молекулярно-динамическое моделирование реакций в гидратированных системах», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Капуста Д.П. поступил на химический факультет Московского Государственного Университета имени М.В. Ломоносова в 2011 г. и окончил его в 2017 г. С 1 октября 2017 г. по 30 сентября 2021 г. обучался в очной аспирантуре химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия. В 2021 г. защитил научно-квалификационную работу «Моделирование физико-химических процессов в сольватированных системах методом молекулярной динамики» с оценкой «отлично». В настоящее время работает в должности учебного мастера 1-ой категории кафедры физической химии химического факультета МГУ.

Капуста Д.П. в период с 2017-2022 гг. подготовил диссертационную работу «Молекулярно-динамическое моделирование реакций в гидратированных системах» в лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. Текст автореферата отражает суть и этапы выполненной работы, где приведены все полученные самостоятельно или в соавторстве теоретические данные и их подробный анализ.

Работа Капусты Д.П. «Молекулярно-динамическое моделирование реакций в гидратированных системах» посвящена решению актуальной задачи – моделированию методом молекулярной динамики влияния растворителя на реакции ферментативного катализа, комплексообразование и таутомеризацию. Разработка эффективных моделей для описания химических процессов в сольватированных системах имеет высокую значимость для науки, поскольку открывает возможность для эффективного компьютерного моделирования и предсказания свойств сольватированных систем.

В ходе работы Капусты Д.П. выполнено изучение влияния размеров и формы сольватной оболочки на величину электростатического потенциала, создаваемого молекулами растворителя на атомах активного сайта фермент-субстратных комплексов матриксной металлопротеиназы 2 (ММР-2) и металло- β -лактамазы. На примере первой стадии реакции протеолиза ММР-2 изучено влияние размера сольватной оболочки на профиль потенциальной энергии. Моделирование процессов комплексообразования каликс-[4]-арена с катионами натрия и цезия позволило получить профили энергии Гиббса диссоциации соответствующих комплексов. Расчеты профилей энергии Гиббса таутомерных переходов в 4,5-диметил-2-(2'-гидроксифенил)имидазола (ДМГИ) позволили определить соотношение нейтральных таутомеров и катионной формы ДМГИ в нейтральном

водном растворе, что позволило объяснить экспериментальные спектры поглощения.

За время работы над диссертационным исследованием Капуста Д.П. успешно освоил широкий спектр современных методов вычислительной и квантовой химии, грамотно подходил к вопросу создания модельных систем и задач. В работе получены важные результаты по относительным значениям энергий Гиббса таутомерных форм ДМГИ и энергий Гиббса диссоциации комплексов каликс-[4]-арена с катионами цезия и натрия.

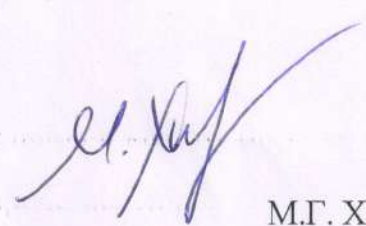
Настоящая диссертационная работа представляет собой целостное научное исследование, обладает научной новизной и практической значимостью.

Капуста Д.П. принял участие в 7 международных и российских конференциях. По теме работы опубликовано 4 статьи в журналах, индексируемых Web of Science, Scopus, RSCI. Являлся исполнителем грантов РФФИ и РНФ. Руководил курсовыми работами студентов 4го курса Химического факультета МГУ.

В процессе выполнения работы Капуста Д.П. зарекомендовал себя как инициативный и целеустремленный молодой исследователь, способный решать научные задачи. Он является вполне сформировавшимся молодым ученым, хорошо владеющий широким спектром методов вычислительной и квантовой химии.

Как научный руководитель считаю, что представленная диссертационная работа является законченным исследованием, отвечающим требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Профессор кафедры физической химии химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», доктор физико-математических наук (специальность 02.00.17 – математическая и квантовая химия)


М.Г. Хренова
Телефон: +74959392035
E-mail: mkhrenova@lcc.chem.msu.ru

21.03.2022г

