

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Пенькова Никиты Викторовича «Молекулярная организация водных растворов биомолекул», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 1.5.2 – «Биофизика» и 1.1.10 – «Биомеханика и биоинженерия»

Диссертационная работа Пенькова Н.В. «Молекулярная организация водных растворов биомолекул» направлена на развитие и углубление представлений о структурно-динамических характеристиках водных растворов биомолекул. Одно из основных направлений работы – изучение гидратации биомолекул с использованием терагерцовой спектроскопии. Как показали первые работы данного направления в 2000-х годах, терагерцовый диапазон позволяет получать принципиально новую и гораздо более полную информацию о гидратации биомолекул, недоступную для других экспериментальных методов. Выявленные динамические гидратные оболочки биомолекул по протяжённости оказались сопоставимы со средним межмолекулярным расстоянием в живых системах, из чего следует их возможная роль в межмолекулярном взаимодействии. В то же время, до сих пор нет детальной информации о молекулярной организации этих гидратных оболочек, что обуславливает актуальность данной работы.

В работе описан подход, позволяющий анализировать гидратацию биомолекул в составе растворов с использованием набора информативных параметров, отражающих межмолекулярную структуру и динамику воды. Методология позволяет анализировать молекулярные релаксационные и колебательные процессы, которые отличаются для гидратной и не гидратной воды. Получены новые данные, существенно дополняющие имеющееся представление о гидратации всех основных типов биомолекул. Показано, что фосфолипидные липосомы проявляют различные характеристики гидратации при разных фазовых состояниях и могут усиливать или ослаблять межмолекулярное связывание воды вблизи липосомы. Показана существенная трансформация гидратной оболочки АТФ при связывании с ионом магния. Белок, изменяя конформацию, но при этом сохраняя коллоидную стабильность, по-разному влияет на воду, что выражается в изменении молекулярных релаксационных параметров воды. Получены новые данные о гидратных оболочках ДНК и сахаров. Показан кооперативный эффект гидратации ДНК, заключающийся в более сильных гидратационных проявлениях полимера по сравнению с мономером. Для сахаров обнаружена противоположная тенденция.

Кроме гидратации в работе анализируется аспект гетерогенности растворов биомолекул. Показано, что кроме размерных фракций биомолекул в растворе могут

присутствовать и другие типы неоднородностей, а именно нанопузырьки. Эта фаза является неотъемлемой частью любого водного раствора и представляет часто встречающийся артефакт при анализе распределений по размерам биомолекул в водных растворах. В работе предлагается простой и оригинальный метод выделения данного артефакта и его устранения.

Сильной стороной диссертационной работы можно назвать существенное развитие хорошо известных экспериментальных методов – THz-TDS, FTIR, DLS – для исследования молекулярной организации водных растворов биомолекул. На многих примерах показана применимость и высокая информативность предлагаемых подходов.

Важно отметить, что работа не является чисто экспериментальной, а содержит теоретические разделы. Получена формула, позволяющая на основании данных THz-TDS проводить расчёт процента свободных молекул воды. Это может использоваться для анализа структурированности воды в водных растворах биомолекул и, следовательно, проявлений гидратации. Впервые получена модель эффективной среды для двухфазных систем с нитевидными включениями и опробована её применимость при анализе диэлектрических характеристик растворов ДНК в ТГц области частот.

Анализ результатов данной работы в совокупности позволяет сделать заключение о глубоком многогранном исследовании, предоставляющем новое понимание о строении водных растворов биомолекул, а также предлагающем новые методические подходы, применимые в других исследованиях.

Автореферат имеет чёткую логичную структуру, основные этапы диссертационного исследования последовательно изложены и понятны. Выводы в полной мере отражают содержание диссертационной работы. Основные результаты опубликованы в международных научных журналах с высоким рейтингом. Часть результатов содержится в патентах РФ на изобретения.

Считаю, что представленная работа полностью отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальностям 1.5.2. – «Биофизика» и 1.1.10 – «Биомеханика и биоинженерия» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова. Соискатель Пеньков Никита Викторович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-

математических наук по специальностям 1.5.2. – «Биофизика» и 1.1.10 – «Биомеханика и биоинженерия».

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры ФН-4 («Физика»)
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана).

Бункин Николай Фёдорович

26.10.2022

Контактные данные:

тел.: +7(916)923-49-95, e-mail: nbunkin@mail.ru

Специальность, по которой защищена диссертация:

01.04.21 – «лазерная физика»

Адрес места работы: 105005, г. Москва, улица 2-я Бауманская, д. 5, к. 1,
МГТУ им. Н.Э. Баумана