

**Заключение диссертационного совета МГУ.014.3(МГУ.02.04)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

Решение диссертационного совета от 28.10.2022 г. №135.

О присуждении Крапивину Владимиру Борисовичу, гражданину России, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Молекулярное моделирование биохимических реакций нитроксильных радикалов и динитрозильных комплексов железа» по специальности 1.4.4. «Физическая химия» принята к защите диссертационным советом 16.09.2022, протокол №118.

Соискатель Крапивин Владимир Борисович 1996 года рождения в 2019 году окончил факультет фундаментальной физико-химической инженерии Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. С 2019 года по настоящее время обучается в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук

Соискатель работает младшим научным сотрудником в в Федеральном исследовательском центре проблем химической физики и медицинской химии РАН.

Диссертация выполнена в институте проблем химической физики РАН.

Научный руководитель - доктор химических наук, старший научный сотрудник Лужков Виктор Борисович, Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, главный научный сотрудник. , .

Официальные оппоненты:

1. доктор химических наук, профессор, Немухин Александр Владимирович;
2. доктор химических наук, профессор, Дьячков Павел Николаевич, Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, лаборатория квантовой химии;
3. кандидат химических наук, Палюлин Владимир Александрович, Химический факультет, Химический факультет.

дали положительные (отрицательные) отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 40 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 10 работ, из них 5 статей в международных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI) и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. – «Физическая химия»:

1. Krapivin V. B., Mendkovich A. S., Sen V. D., Luzhkov V. B. Quantum chemical calculations of hydration electrostatics and electrochemical oxidation potential of cyclic nitroxide radicals // Mendeleev Communications. 2019. V. 29. № 1. P. 77-79. DOI:10.1016/j.mencom.2019.01.026 (IF=1,837 Web of Science).
2. Krapivin V. B., Sen V. D., Luzhkov V. B. Quantum chemical calculations of the one-electron oxidation potential of nitroxide spin labels in biologically active compounds // Chemical Physics. 2019. V. 522. P. 214-219. DOI:10.1016/j.chemphys.2019.02.021 (IF=2,552 Web of Science).
3. Pokidova O. V., Luzhkov V. B., Emel'yanova N. S., Krapivin V. B., Kotelnikov A. I., Sanina, N. A., Aldoshin S. M. Effect of albumin on the transformation of dinitrosyl iron complexes with thiourea ligands // Dalton Transactions. 2020. V. 49. № 36. P. 12674-12685. DOI:10.1039/D0DT02452J (IF=4,569 Web of Science).
4. Крапивин В. Б., Лужков В. Б. Молекулярное моделирование конформационной динамики нитроксильных производных хитозана в водном растворе // Известия Академии наук. Серия химическая. 2021. № 8. С. 1523-1532. DOI:10.1007/s11172-021-3247-7 (IF=1,682 RSCI).
5. Krapivin V. B., Luzhkov V. B., Sanina N. A., Aldoshin S. M. Decomposition of dinitrosyl iron complex with thioformaldehyde ligands in water: reaction mechanisms and the role of chemical hardness of ligands // Mendeleev Communications. 2022. V. 32. P. 457-459. DOI:10.1016/j.mencom.2022.07.010 (IF=1,837 Web of Science).

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области квантовой химии, молекулярной механики и молекулярной динамики, а также наличием публикаций в высокорейтинговых международных научных журналах по темам, связанным с предметом диссертационного исследования.

. ____ в ____ (Импакт-фактор по ____ – ____)

На диссертацию и автореферат поступило 0 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области квантовой химии, молекулярной механики и молекулярной динамики, а также наличием публикаций в высокорейтинговых международных научных журналах по темам, связанным с предметом диссертационного исследования.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором теоретических исследований с использованием теории функционала плотности и континуальных моделей растворителя рассчитаны окислительно-восстановительные потенциалы нитроксильных производных олигомеров хитозана; установлен ассоциативный механизм гидролиза динитрозильных комплексов железа с серосодержащими лигандами; методами молекулярной механики и молекулярной динамики определена структура хитозан-нитроксилов и найдены сайты связывания тиомочевинного железо-нитрозильного комплекса с бычьим сывороточным альбумином.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Квантово-химические расчеты на уровне B3LYP/6-31+G(d,p)//M052X/6-311+G(2df,2p) PCM(SMD) определяют электрохимические потенциалы циклических нитроксильных радикалов со статистической погрешностью до 10 мВ. Электрохимические потенциалы окисления пиперидин- и пирролин-N-оксида повышаются на 70-90 мВ при их включении в олигомеры хитозана.
2. В газовой фазе скрученные конформации низкомолекулярных олигомеров хитозана стабильнее линейной на 1-7 кДж/моль на звено, в отличие от ситуации в водной среде, где линейная конформация стабилизирована на 4-12 кДж/моль на звено по сравнению со скрученными.
3. Барьер реакции гидролиза катионного динитрозильного комплекса железа на основе тиоформальдегида в анаэробном растворе в случае ассоциативного механизма составляет 3-7 кДж/моль, в то время как для диссоциативного механизма барьер реакции равен 26-27 кДж/моль.
4. Связывание тиомочевинного динитрозильного комплекса железа с бычьим сывороточным альбумином происходит по шести сайтам, локализованным на IA, IIА и IIВ субъединицах белка.

На заседании 28.10.2022 года диссертационный совет принял решение присудить Крапивину Владимиру Борисовичу ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них доктора(ов) наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия» – 4 человек(а), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 14, «против» – 0, «недействительных бюллетеней» – 0.

Председатель совета,
д.х.н. доц.

Горюнков А. А.

Ученый секретарь совета,
к.х.н., доц.

Шилина М. И.