

## ОТЗЫВ

на магистерскую диссертацию Иванова Евгения Игоревича  
«Моделирование взаимодействия белков с лекарственными  
препаратами»

Методика моделирования эффективности действия лекарственных препаратов, предложенная в диссертационной работе, является очень актуальной, так как с ее помощью можно выделить необходимые препараты до экспериментального испытания их биологической активности на животных. Задача усложнялась тем, что методы квантовой механики, которые необходимо использовать для описания электронных свойств взаимодействующих систем, реализованные в квантовохимической программе Gaussian 03, было необходимо адаптировать для расчета белков. На этом пути пришлось преодолеть много трудностей. Умение работать с различными программами и в разных средах помогло магистранту справиться с этой задачей. На примере изучения процесса взаимодействия на молекулярном уровне ряда лекарств с рецептором белка получены нетривиальные результаты.

Евгений Игоревич Иванов разобрался в сложном теоретическом аппарате квантовой механики, в теории метода функционала электронной плотности, в строгих расчетных методах квантовой химии, реализованных в программе Gaussian 03. Он является сложившимся исследователем, его отличает способность к самостоятельной научной работе, умение не останавливаться перед возникшими проблемами, преодолевать трудности.

Расчеты проводились в параллельном режиме вычислений с использованием высокопроизводительного вычислительного комплекса факультета ПМ-ПУ. К сожалению, недостаточное знание химии не позволило проанализировать все аспекты реакционной способности и свойств молекул на основании многочисленных вычисленных характеристик электронной структуры рассматриваемых систем. Методическая часть работы также не доведена до конца.

Считаю, что представленная диссертация заслуживает оценки «хорошо», а ее автор достоин присуждения ему степени магистра.

Научный руководитель  
к.х.н., доцент



Бедрина М.Е.