

## РЕЦЕНЗИЯ

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

Работа носит пионерский характер и посвящена ранее не предпринимавшейся попытке методом квантовохимических расчетов разработать методику теоретического предсказания эффективности лекарственных препаратов ряда изотестостерона.

Эта задача несомненно представляет как теоретический, так и практический интерес. Расчеты выполнены на современном научном уровне с использованием различных программных пакетов и мощного вычислительного комплекса.

Для отдельных молекул лекарств теоретически оценены молекулярные характеристики, которые еще не получены экспериментально. К сожалению, они не приводятся в диссертации в полном объеме. Сложный процесс взаимодействия лекарства с молекулой белка корректно описывается методом функционала электронной плотности. Формула вычисления энергии взаимодействия, предложенная магистрантом, также не вызывает сомнений.

Полученные результаты убедительно показывают перспективность намеченного пути исследования, первой ступенькой которого является рецензируемая диссертация.

Текст работы достаточно ясный, но рукопись оформлена небрежно. На представление результативной части работы отводится меньше места, чем на анализ используемых расчетных методов.

Тем не менее, магистерская диссертация в целом соответствует требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам. На основании вышеизложенного рецензируемая работа заслуживает оценки «хорошо» или «отлично» на усмотрение комиссии.

Рецензент  
к.х.н., ст.н.с.



Глебовский Д.Н.

*Подпись Глебовского Д.Н. заверю: [подпись]  
Генер. по кадрам отдела кадров по направлению  
Ошине (Керемшарова Ю.В.)*

