

ОТЗЫВ

научного руководителя, доктора физ.-мат. наук, профессора РАН С.В. Люлина
на выпускную работу бакалавра кафедры молекулярной биофизики и физики
полимеров Санкт-Петербургского государственного университета

БОЙКО ОКСАНЫ СЕРГЕЕВНЫ

«Моделирование полиаспарагиновой кислоты в растворах минеральных солей»

Поиск материалов, предназначенных для восстановления или замещения костной ткани, – одна из приоритетных задач в области тканевой инженерии. Наиболее перспективные подходы к синтезу таких материалов основаны на имитации процесса формирования костной ткани в организме. Известно, что в формировании костной ткани участвуют неколлагеновые белки-посредники, доставляющие минеральные ионы в поры органической матрицы. В эксперименте достичь более качественной минерализации органической матрицы, а именно заполнения пор минеральной фазой, позволяет использование аналогов таких белков (чаще всего поли- α -L-аспарагиновой кислоты). Молекулярные механизмы, ответственные за минерализацию органической матрицы остаются не раскрытыми. Одним из этапов этого процесса является формирование комплекса полимера с минеральными ионами. Исследование конформационных изменений молекулы полиэлектролитного посредника в результате адсорбции на нее многовалентных минеральных ионов является первоочередной задачей, решению которой посвящена бакалаврская работа О.С. Бойко. О.С. Бойко исследовала методами атомистического моделирования конформационные характеристики поли- α -L-аспарагиновой кислоты в водных растворах хлорида кальция при различных концентрациях.

Данное исследование было проведено впервые. Показано, что в результате адсорбции ионов радиус инерции молекулы полиаспарагиновой кислоты уменьшается. При этом, с ростом концентрации радиус инерции меняется немонотонно. При низких концентрациях значение радиуса инерции с ростом контракции резко уменьшается, а при высоких концентрациях (при которых наблюдается инверсия заряда за счет адсорбции ионов кальция на полимере) – увеличивается. Кроме того, адсорбция ионов на молекулу приводит к изменению распределения углов внутреннего вращения основной цепи. Так, увеличивается доля углов, отвечающих структуре левозакрученной α -спирали, которая практически отсутствует в воде. Было показано, что время жизни контакта иона кальция с карбоксильными группами полиаспарагиновой кислоты соизмеримо с временем моделирования. Поэтому для получения более корректных результатов необходимо

проведение дополнительного моделирования, которые уже проводится О.С. Бойко в настоящее время. Полученные результаты были представлены на Российских и международных конференциях.

В процессе выполнения работы О.С. Бойко показала себя трудолюбивым, ответственным и инициативным исполнителем, изучила научную литературу, посвященную вопросам полимериндуцированной минерализации и описанию полиэлектролитных молекул в растворах минеральных солей, получила навыки работы с программным пакетом Gromacs (основным инструментом для моделирования методом молекулярной динамики).

Учитывая все вышесказанное, считаю, что бакалаврская работа О.С. Бойко отвечает всем предъявляемым требованиям и заслуживает оценки отлично, а сама О.С. Бойко заслуживает присуждения ей степени бакалавра по направлению «Физика».

“19” мая 2017 г.

Научный руководитель,
доктор физико-математических наук,
профессор РАН,
директор ИВС РАН



С.В. Люлин

