

**Отзыв научного руководителя
на выпускную квалификационную работу Карпова Валерия Владимировича
«Квантово-химическое исследование роли невалентных взаимодействий в
каталитической активности глутатионпероксидазы»**

Выпускная квалификационная работа Валерия Владимировича Карпова посвящена исследованию невалентных взаимодействий в активном центре антиоксидантного фермента – глутатионпероксидазы. Этот фермент защищает биомолекулы от окислительного повреждения и предотвращает развитие сердечно-сосудистых и нейродегенеративных заболеваний. Актуальность и востребованность настоящей работы обусловлена задачами современной биохимии, в частности в области создания новых таргетных низкомолекулярных препаратов антиоксидантного действия. В рамках данной работы методами квантовой химии было проведено и моделирование активного центра глутатионпероксидазы на примере модельных соединений и сделаны выводы об изменениях в электронной оболочке атома селена вдоль каталитического цикла, связанных с образованием дополнительных невалентных взаимодействий.

Работа, проделанная Валерием в рамках магистерской диссертации, отличается довольно высоким уровнем самостоятельности как в постановке задач, так и в обработке результатов. Результаты работы уже опубликованы в двух статьях в журналах, относящихся к первому квартилю, а также представлены в виде устных и постерных докладов на различных конференциях.

Валерий Владимирович Карпов является активным членом коллектива «Лаборатории невалентных взаимодействий» кафедры физической органической химии института химии СПбГУ – помимо работы над магистерской, он участвовал в реализации нескольких дополнительных проектов, посвящённых квантово-химическим исследованиям поведения литий-органических реагентов в растворе и циклизации изоксазолов, результаты работы над которыми опубликованы в четырёх статьях.

Таким образом, я считаю, что выпускная квалификационная работа Валерия Владимировича Карпова заслуживает оценки «отлично».

к.ф.-м.н., ст. преп. Тупикина Елена Юрьевна



23 мая 2022