

ЗАКЛЮЧЕНИЕ диссертационного совета **24.1.225.01**, созданного на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
«Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени **кандидата наук**

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 13 апреля 2022 г., протокол № 06

о присуждении **Магсумову Тимуру Ильнуровичу**, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата химических наук.

Диссертация **«Подавление гидрофобного эффекта органическими сорастворителями»** по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 10 февраля 2022 г., протокол № 04, диссертационным советом 24.1.225.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420111, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31, приказ Минобрнауки РФ № 553/нк от 23.05.2018.

Соискатель **Магсумов Тимур Ильнурович**, 17.10.1994 года рождения, в 2017 г. окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ) по специальности «Фундаментальная и прикладная химия». В 2017-2021 гг. обучался в очной аспирантуре ФГАОУ ВО КФУ по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ.

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент **Седов Игорь Алексеевич**, ведущий научный сотрудник Химического института им. А.М. Бутлерова ФГАОУ ВО КФУ.

Официальные оппоненты:

Батов Дмитрий Вячеславович, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник объединенного физико-химического центра растворов ИХР РАН и ИГХТУ, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,

Селиванова Наталья Михайловна, доктор химических наук, доцент, профессор кафедры физической и коллоидной химии, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет»,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук – в своем положительном заключении, составленном и подписанным заведующим лабораторией молекулярной динамики и структуры, доктором физико-математических наук Медведевым Николаем Николаевичем, указала, что «диссертационная работа соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия», «по актуальности, научной и практической значимости, научной новизне, достоверности полученных результатов и объему выполненных исследований диссертационная работа Магсумова Т.И. «Подавление гидрофобного эффекта органическими соразтворителями» соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» <...>, а её автор, Магсумов Тимур Ильнурович, заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается общностью тематики и областью научных интересов ведущей организации и официальных оппонентов, а именно: исследованиями в области термодинамики растворов и межмолекулярных взаимодействий.

На автореферат диссертации поступило 6 отзывов, все положительные.

Отзывы получены от:

- д.х.н. Деркач С.Р. (Мурманский государственный технический университет), *отзыв содержит вопрос о причинах выбора бензола при сравнении сольватации и денатурации;*
- д.х.н. Колкера А.М. (Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН), *в качестве замечания рекомендуется использовать понятие «процесс» вместо «механизм» при обсуждении денатурации лизоцима;*
- д.б.н. Артюхова В.Г. и д.б.н. Холявка М.Г. (Воронежский государственный университет), *рекомендуется сравнить влияние органических растворителей на температуру денатурации для различных белков;*
- д.х.н. Мирошниченко Е.А. (Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН), *в качестве замечания отмечается отсутствие в автореферате описания и метрологической проверки экспериментальных и теоретических методик исследования;*
- д.х.н. Гладилина А.К. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова), *в качестве пожелания предложено расширить круг исследуемых белков для определения универсальности закономерностей влияния органических растворителей;*
- д.х.н. Каргова С.И. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова), *отзыв без замечаний.*

Соискатель является соавтором 16 статей, 9 из них – по теме диссертации, все опубликованы в журналах, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования Web of Science и Scopus. Общий объём опубликованных по теме диссертации работ составляет 80 стр. Работы написаны соискателем в соавторстве с другими исследователями, личный вклад диссертанта заключается в выполнении всей экспериментальной работы, в анализе литературных данных и обобщении полученных результатов. Диссертационная работа не содержит недостоверных сведений об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значимые работы:

1. Sedov, I.A. Thermodynamic Functions of Solvation of Hydrocarbons, Noble Gases, and Hard Spheres in Tetrahydrofuran–Water Mixtures / I.A. Sedov, T.I. Magsumov // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2015. – Vol. 119. – № 28. – P. 8773-8780.

2. Sedov, I.A. Thermodynamic functions of solvation of benzene in various binary aqueous-organic solvents / I.A. Sedov, T.I. Magsumov, B.N. Solomonov // *Journal of Molecular Liquids*. – 2016. – Vol. 224. – P. 1205-1209.

3. Magsumov, T. The Effect of Dimethyl Sulfoxide on the Lysozyme Unfolding Kinetics, Thermodynamics, and Mechanism / T. Magsumov, A. Fatkhutdinova, T. Mukhametzyanov, I. Sedov // *Biomolecules*. – 2019. – Vol. 9. – № 10. – P. 547.

4. Magsumov, T. Comparative study of the protein denaturing ability of different organic cosolvents / T. Magsumov, L. Ziyang, I. Sedov // *International Journal of Biological Macromolecules*. – 2020. – Vol. 160. – P. 880-888.

5. Sedov, I.A. Molecular dynamics study of unfolding of lysozyme in water and its mixtures with dimethyl sulfoxide / I.A. Sedov, T.I. Magsumov // *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. – 2017. – Vol. 76. – P. 466-474.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **определены** неизвестные ранее значения энергий Гиббса и энтальпий сольватации ряда малополярных соединений в смесях воды с органическими растворителями в широком диапазоне концентраций. **Показано**, что различные органические растворители подавляют гидрофобный эффект с разной силой;

– **получены** новые расчетные данные по термодинамическим функциям образования полостей в различных водно-органических смесях. **Показано**, что ослабление гидрофобного эффекта при добавлении органического растворителя связано с изменением термодинамики процесса образования полости;

– **показана** связь между денатурирующей способностью водно-органических смесей и сольватационными свойствами этих смесей по отношению к малополярным соединениям;

– **показано**, что в присутствии различных органических растворителей не только снижается термическая стабильность лизоцима, но и изменяется механизм термически индуцированного разрушения его нативной структуры. Во многих случаях при этом разрушение элементов вторичной структуры продолжается после исчезновения нативной третичной структуры, в то время как в чистой воде эти процессы происходят синхронно.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– **показана** связь между подавлением гидрофобного эффекта различными растворителями, их влиянием на термодинамику сольватации низкомолекулярных малополярных соединений и процесс денатурации белков в водно-органических смесях;

– **показано**, что подавление гидрофобного эффекта обусловлено изменением термодинамических параметров процесса образования полости при добавлении органического растворителя.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

– полученные значения коэффициентов активности и энтальпий растворения, а также термодинамические функции образования полости могут быть использованы для параметризации моделей, используемых для расчета растворимости;

– полученные данные о денатурирующей способности растворителей могут быть использованы для выбора наиболее подходящего растворителя при проведении ферментативных реакций в водно-органических средах.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что достоверность результатов подтверждается использованием современного оборудования и апробированных методик исследования, воспроизводимостью полученных экспериментальных и расчетных данных и их согласием с описанными ранее в литературе результатами.

Личный вклад соискателя заключается в получении всех экспериментальных данных, представленных в работе; проведении анализа литературы, математической обработки экспериментальных и литературных данных, расчетов методом молекулярной динамики; соискатель провел анализ

и обобщение полученных результатов и участвовал в подготовке публикаций по теме диссертационного исследования.

Магсумов Т.И. исчерпывающе ответил на вопросы, заданные в ходе заседания диссертационного совета. Критических замечаний высказано не было.

На заседании 13 апреля 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Магсумову Тимуру Ильнуровичу ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия за решение научной задачи, заключающейся в установлении закономерностей подавления гидрофобного эффекта в водно-органических смесях в зависимости от природы и концентрации органического соразтворителя на примере процессов сольватации неполярных соединений и снижения термической стабильности белков.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 26 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета,

академик

Синяшин Олег Герольдович

Ученый секретарь диссертационного совета,

к.х.н.

Торопчина Асия Васильевна

13 апреля 2022 года