

СТАНОВИЩЕ

върху дисертация на тема *„Квантово-химично изследване влиянието на водородни връзки и метални йони върху РНК”*

на **Стефан Колев Колев**

редовен докторант в катедра Органична химия, Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Климент Охридски”

за присъждане на научната и образователна степен „Доктор”

от проф. дхн Георги Николов Вайсилов, Факултет по химия и фармация, СУ „Св. Климент Охридски” (научен ръководител на докторанта)

Стефан Колев е завършил Химическия факултет на СУ (сега Факултет по Химия и Фармация) като бакалавър през 2006 г., след което е завършил магистратура „Органични материали във високите технологии” в същия факултет. От 2010 до 2013 г. той е докторант в катедра Органична химия на факултета под мое ръководство и с научен консултант гл. ас. д-р Петко Петков.

Дисертацията на Стефан Колев е посветена на теоретично изследване с помощта на съвременни квантово-механични методи на два типа взаимодействия, свързани със структурата и функционирането на РНК.

Първата част от изследването включва образуването на водородни връзки на метанол със серия протоноакцепторни групи. В изследването е оценена възможността различните функционални групи да инхибират синтеза на пептидна връзка в рибозомата чрез формиране на водородна връзка като протоноакцептор към 2'-ОН групата на рибозата. В рамките на изследването са проследени зависимостите на типа на образуваните водородни връзки, структурата и енталпиите на образуване на комплексите от типа на протоноакцепторния център. Предложена е и модификация на процедурата за коригиране на изчислените вибрационни честоти на валентните трептения на ОН групата, когато тя участва във водородна връзка. На основата на изчислените енталпии на образуване на водородните връзки е показано, че вторичните и третични амини, алкокси групите, депротонираните карбоксилни киселини и някои алифатни флуориди могат да инхибират биосинтеза на протеини ако попаднат в активния център на рибозомата.

Втората част от изследванията са насочени към координирането на метални йони към скелета на нуклеинови киселини и по-специално към изследването на разположението и динамика на натриеви и магнезиеви йони около фосфатния скелет на РНК във водна среда. Изследването показва, че натриевите йони са мобилни, често сменят позицията си спрямо фосфатните групи и броя на координираните към тях водни молекули. За разлика от тях, магнезиевите йони запазват както лигандите в първата си координационна обвивка, така и позицията си спрямо фосфатната група.

Като научен ръководител на дисертанта ще отбележа моите отлични впечатления от работата на Стефан Колев. По време на работата той прояви способност бързо да усвоява и прилага най-сложни нови теоретични методи и подходи, да използва успешно различни квантово-химични програмни пакети, да анализира проблемите и да търси пътища за тяхното решаване. Искам да обърна внимание на симулациите на металните йони, което е първото изследване на динамиката на натриеви и магнезиеви йони около скелета на РНК във воден разтвор с *ab initio* молекулна динамика.

Стефан Колев е представил резултатите от научните си изследвания в десет доклада на национални научни прояви, част от които с международно участие. През последните няколко години той взе активно участие в подготовката на ежегодните Национални конференции по Химия за студенти и докторанти.

Дисертационният труд съдържа научни или научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и показва, че кандидатът притежава задълбочени теоретични знания по теоретична химия и способности за самостоятелни научни изследвания. В съгласие с препоръчителните изисквания на ФХФ, резултатите от изследванията са публикувани в две статии в специализирани научни списания, реферирани в ISI Web of Knowledge, *J. Phys. Chem. A* (2011 г.) и *ACS Chem. Biol.* (2013 г.). Забелязани са и 4 цитата на първата статия.

Намирам, че дисертационният труд на Стефан Колев Колев напълно съответства на изискванията и предлагам на Почитаемото научно жури да му присъди научната и образователната степен „доктор” по научно направление „Химически науки“.

15.03.2014 г.

/проф. дхн Георги Вайсилов/