

СТАНОВИЩЕ

от д-р **Цонка Иванова Минева**

Equipe Matériaux Avancés pour la Catalyse et la Santé (MACS)
Institut Charles Gerhardt - UMR 5253 CNRS/ENSCM/UM2/UM1
8, rue de l'Ecole Normale - 34296 Montpellier cedex 5 – France
tel.: +33 (0)4 67 16 34 68
fax: +33 (0)4 67 16 34 70
e.m. tzonka.mineva@enscm.fr

за дисертационния труд на **Стефан Колев Колев**,
докторант в Химически факултет, СУ „Св. Климент Охридски”

на тема: „*Квантово-химично изследване влиянието на водородни връзки и метални йони върху РНК*”, представена за присъждане на образователната и научна степен „доктор”

В дисертационния труд на г-н Колев са докладвани серия структурни характеристики, получени от числено моделиране, на (1) комплекси на метанол с редица органични молекули като инхибитори на образуването на пептидна връзка и (2) фосфатен скелет на РНК във воден разтвор с натриеви и магнезиеви йони. Представеният труд започва с много ясен увод, в който са формулариани точно и конкретно поставените цели на изследването. После следва пълна и добре описана ситуация на проблематиката в литературата, което позволява да се разбере лесно актуалността и нуждата от представените теоретични изследвания. Старателно и в синтезиран вид са описани използваните теоретични методи, като са представени в детайли числените параметри. Резултатите са изложени в последващите две глави, последвани от добре формулирани заключения.

Използваните теоретични методи са напълно подходящи за поставените цели. Прави впечатление систематичността при тези изследвания, доброто оформяне на резултатите и критичното им дискутиране. Пресметнатите геометрични параметри, енталпия на образуване на водородни връзки и вибрационни честоти са правилно използвани за разбиране ролята на органичните инхибитори при синтеза на пептидната връзка.

Статистическите функции като радиално разпределителна функция (RDF) и средни разстояния между йоните и кислородните атоми в най-близкото обкръжение на водните молекули, позволяват да се оцени степента на солватация на йоните. Важното при получаването на тези резултати е, че в моделирането са отчетени както водната среда така и температурата. За разлика от съществуващите в литературата данни, представените тука динамични симулации са направени в комбинация с методите, основаващи се на теорията на функционала на плътността (DFT). Това позволява да се проследи разкъсването и формирането на водородни и ковалентни връзки. Последното не може да се направи със стандартните методи на динамична симулация, на базата на параметризираните класически силови полета. Независимо, че изследваните модели са минимизирани по размери, старателността при анализа на резултатите, тяхното

систематично получаване и разглеждане, както и надеждността на използваните методи, напълно са позволили да се отговори на поставените въпроси и съответства на целите на дисертацията.

Интересно би било да се коментира накратко дали добавянето на емпирична дисперсия към ВЗЛУР обменно-корелационното приближение би довело до подобни резултати като тези с функционалите, параметризирани за отчитане взаимодействията на средно и дълго разстояние (като използвания тука M05–2X, например). Освен това дали в динамичните симулации с РВЕ функционала добавянето пак на емпирична дисперсия по формулата на Лондон би довело до по-силни водородни връзки. И последният ми въпрос е свързан с избора на размерите на куба с вода – има ли значение за динамичното поведение на моделната РНК и металните йони, ако има взаимодействие между техните образи в съседни кутии? И ако има каква е неговата важност?

Заключение: Смятам, че резултатите в този труд са надежни, много добре са описани и анализирани, и представляват много полезна информация.

Предвид на горепосоченото убедено предлагам на почитаемото Научно жури да присъди научната и образователна степен "доктор" на Стефан Колев Колев.

Монпелие, 29.03.2014

Подпис: 