

О Т З Ы В
на автореферат диссертации
Ивонцина Леонида Андреевича
"Молекулярно-динамическое моделирование протонных полуканалов
бактериальной F_0F_1 -АТФсинтазы"
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 1.5.8. «Математическая биология, биоинформатика»

В последние десятилетия наблюдается резкий рост структурных биологических данных, связанный как с развитием и совершенствованием экспериментальных методов, так и с увеличением использования компьютерных технологий и искусственного интеллекта в естественно-научных задачах. Однако не всегда получение структур высокого разрешения говорит о понимании фундаментальных принципов работы ферментов.

Высокая актуальность темы диссертации Ивонцина Л.А. обусловлена необходимостью анализа новых данных по структурным характеристикам F_0F_1 -АТФсинтазы. Кроме того, важно отметить, что на текущий момент не существует полного описания структуры протонных полуканалов в такой динамической системе, как F_0F_1 -АТФсинтаза, учитывающего не только взаимное расположение субъединиц белка, но и влияние окружающей среды.

Основным препятствием при моделировании транспорта протонов в биологических объектах выступает неопределенность положений молекул воды, данные о которых в отдельных случаях крайне затруднительно получить структурными методами исследований.

Эта трудность была преодолена автором с помощью изящного решения: применить подходы, позволяющие при помощи моделирования оценить положения, которые молекулы воды занимают в канале в условиях равновесия. Важно отметить, что тут соискателем были применены сразу три подхода – один оригинальный, основанный на методе твердых сфер, второй, реализованный в рамках электростатического подхода с помощью программы Dowser++, и третий – на основе молекулярно-динамического моделирования. Полученное хорошее согласие в данных свидетельствует о корректности этих подходов.

Диссертант смог также исследовать влияние ряда мутаций существенных полярных остатков входного полуканала на гидратацию.

Весьма значимыми по мнению автора отзыва являются полученные выводы о локализации входного и выходного полуканалов, а также впервые обнаруженные им устойчивые пространственные положения боковых групп для ряда существенных аминокислотных остатков.

Следует отметить высокий уровень публикаций диссертанта по теме работы, две из них в журналах уровня Q1, одна в журнале уровня Q2, при этом во всех публикациях диссертант является первым автором.

Существенных замечаний по автореферату у автора отзыва нет.

Диссертационная работа Ивонцина Л.А. выполнена на высоком научном уровне, несомненно является законченным научным исследованием, отвечает всем требованиям пунктов 2.1-2.5, предъявляемым Положением о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а соискатель Ивонцин Леонид Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.8. «Математическая биология, биоинформатика».

Мяконьких Андрей Валерьевич,

Кандидат физико-математических наук (специальность, по которой защищена диссертация: 05.27.01 - Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах)

Доцент кафедры микроэлектроники и квантовых компьютеров Физтех-школы электроники, фотоники и молекулярной физики

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Адрес места работы: Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9.

Тел. 8

E-mail

mail.com

_____(Мяконьких А.В.)

21 февраля 2025 г.

ПОДПИСЬ
ЗАВЕРЯЮ:
АДМИНИСТР
АДМИНИСТР
О. А. КОРАЙ

<

