

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Кривицкой Александры Вячеславовны** на тему:
«Молекулярное моделирование механизмов ферментативных реакций, связанных с бактериальной резистентностью к β -лактамным антибиотикам» по специальности 1.5.8. – математическая биология, биоинформатика (физико-математические науки)

Диссертационная работа Кривицкой А.В. посвящена определению молекулярных механизмов взаимодействия β -лактамных антибиотиков и ингибиторов с бактериальными ферментами металло- β -лактамазами и пенициллин связывающими белками. В работе применяются современные методы суперкомпьютерного молекулярного моделирования, включая метод молекулярной динамики с комбинированными потенциалами квантовой механики / молекулярной механики, а также методы анализа электронной плотности в активном центре для детализации механизма реакции, а также ранжирования схожих соединений по их реакционной способности. Автором получены важные результаты, связанные с определением на молекулярном уровне влияния аминокислотных замен на каталитические параметры пенициллин связывающего белка PBP2 по отношению к антибиотику цефтриаксону, являющемуся основой терапии гонореи. Также предложены подходы для рационального дизайна новых ингибиторов металло- β -лактамаз.

Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне, является законченным самостоятельным и оригинальным исследованием. Поставленные в работе цели и задачи достигнуты и решены.

Диссертационная работа прошла апробацию и докладывалась на 21 всероссийских и международных конференциях. Материалы диссертации опубликованы в 6 статьях в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science.

Автореферат написан ясно и практически не содержит опечаток, выводы работы обоснованы.

Диссертационная работа Кривицкой А.В. является законченным научным исследованием и отвечает всем требованиям пп 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а автор заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.8. – математическая биология, биоинформатика.

Научный руководитель ФИЦ Биотехнологии РАН
академик РАН, профессор
доктор химических наук по специальности
03.00.04 – биохимия



Попов Владимир Олегович

ФГУ Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
Адрес: 119071 Российская Федерация, г. Москва, Ленинский проспект, дом 33, строение 2
Тел: +7(495)9545283
E-mail: v.popov@fbras.ru
11.06.2024 г.