

Заключение диссертационного совета МГУ.015.5
по диссертации на соискание ученой степени кандидата биологических наук
Решение диссертационного совета от «04» декабря 2025 г. № 14

О присуждении Васюченко Екатерине Павловне, гражданину РФ, ученой степени кандидата биологических наук.

Диссертация «Исследование молекулярных механизмов антимикробного действия метиленового синего методами компьютерного моделирования» по специальности 1.5.2. Биофизика принята к защите диссертационным советом 23 октября 2025 г., протокол № 11.

Соискатель – Васюченко Екатерина Павловна 1997 года рождения, в 2025 соискатель окончила аспирантуру биологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по направлению «06.06.01. Биологические науки».

В настоящее время соискатель работает младшим научным сотрудником Института перспективных исследований проблем искусственного интеллекта и интеллектуальных систем Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Диссертация выполнена на кафедре биофизики биологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, **Коваленко Илья Борисович**, ведущий научный сотрудник кафедры биофизики биологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова;

доктор биологических наук, **Страховская Марина Глебовна**, доцент кафедры синтетической биологии биологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

Ларичев Виктор Филиппович, доктор медицинских наук, ведущий научный сотрудник лаборатории биологии и индикации арбовирусов, ФГБУ "Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии имени почетного академика Н.Ф. Гамалеи" Министерства здравоохранения Российской Федерации;

Холмуродов Холмирзо Тагойкулович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Международной межправительственной научно-исследовательской организации «Объединенный институт ядерных исследований»;

Чемерис Николай Константинович, доктор биологических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории механизмов регуляции биосистем Института биофизики клетки Российской академии наук — обособленное подразделение ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Пущинский научный центр биологических исследований РАН»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высоким уровнем компетентности в области биофизики и наличием соответствующих публикаций в ведущих российских и международных журналах.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 5 работ, из них 5 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.5.2. Биофизика (в скобках приведен импакт-фактор журналов; объём публикации в печатных листах/вклад автора в печатных листах):

1. **Васюченко Е.П.**, Страховская М.Г., Коваленко И.Б., Фурсова П.В., Рубин А.Б. Особенности электростатического взаимодействия метиленового синего с белковой оболочкой флавивирусов // Математическая биология и биоинформатика. – 2025. – Т. 20. – №2. – С. 532–542. DOI: 10.17537/2025.20.532 (Импакт-фактор 0,391 (РИНЦ); 0,7 п.л./0,6 п.л.)
2. **Васюченко Е.П.**, Холина Е.Г., Федоров В.А., Страховская М.Г., Коваленко И.Б., Рубин А.Б. Молекулярное моделирование взаимодействия метиленового синего с виропорином коронавируса SARS-CoV-2 // Вестник Московского университета. Серия 16. Биология. – 2025. – Т. 80. – №2. – С. 96–104. EDN: HQMVZK. (Импакт-фактор 0,306 (РИНЦ); 0,8/0,7 п.л.)
3. Kovalenko I., Kholina E., Fedorov V., Khruschev S., **Vasyuchenko E.**, Meerovich G., Strakhovskaya M. Interaction of Methylene Blue with Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 Envelope Revealed by Molecular Modeling // International Journal of

Molecular Sciences. – 2023. – Vol. 24. – No. 21. – P. 15909. EDN: JXMOHE. (Импакт-фактор 4,9 (JIF); 1,3/0,6 п.л.)

4. **Vasyuchenko E.P.**, Fedorov V.A., Kholina E.G., Khruschev S.S., Kovalenko I.B. Strakhovskaya M.G. Calculation of Electrostatic Potential Field of Coronavirus S Proteins for Brownian Dynamics Simulations // Supercomputing Frontiers and Innovations. – 2022. – Vol. 9. – No. 3. – P. 65-71. EDN: BZRMHI. (Импакт-фактор 0,178 (SJR); 0,5/0,4 п.л.)
5. **Vasyuchenko E.P.**, Orekhov P.S., Armeev G.A., Bozdaganyan M.E. CPE-DB: An open database of chemical penetration enhancers // Pharmaceutics. – 2021. – Vol. 13. – No. 1. – P. 66. EDN: ZBCZPS. (Импакт-фактор 5,5 (JIF); 1/0,4 п.л.)

На автореферат диссертации поступило 2 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата биологических наук является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задач, имеющих существенное значение для биофизики, а именно:

1. В компьютерной модели удалось воспроизвести реализацию процесса взаимодействия метиленового синего с белками оболочки коронавирусов и flavивирусов и определить ключевые аминокислоты, контакты с которыми могут приводить к ингибированию функциональной активности вирусных структур.
2. Методом броуновской динамики выявлены сайты связывания молекул метиленового синего на таких структурных компонентах оболочки коронавирусов, как S, E белки и отрицательно заряженные липиды мембранны оболочки.
3. Применение метода броуновской динамики с использованием созданных моделей целых белковых оболочек вируса Зика и вируса денге позволило детально изучить взаимодействие с ними метиленового синего и выявить особенности молекулярного строения белков оболочки, существенные для проявления различий в связывании метиленового синего между этими двумя вирусами.
4. Получены энергетические характеристики взаимодействия метиленового синего с конкретными структурными элементами вирусной оболочки.
5. Оценка энергии прохождения метиленового синего через ERGIC-подобную мембрану без и со встроенным в неё каналом виропорина SARS-CoV-2 позволила выявить высокий энергетический барьер на пути проникновения метиленового синего через мембрану. При наличии в мембране виропоринов найдена предпочтительная локализация молекул метиленового синего в центре канала, которая обеспечивается π - π взаимодействиями с остатками фенилаланина.

Диссертация представляет собой самостоятельное завершенное исследование, обладающее внутренним единством.

Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Использование молекулярных моделей оболочек вирусов в сочетании с методом броуновской динамики позволяет выявлять области связывания заряженных молекул противовирусных соединений и анализировать их контакты с функционально значимыми компонентами.

2. Различия в распределении электростатического потенциала вокруг белков оболочек флавивирусов определяет доступность их функциональных петель для электростатических взаимодействий с противовирусными соединениями.

3. Близкое пространственное расположение аминокислотных остатков со сходными физико-химическими свойствами в пентамерном виропорине коронавируса обуславливает образование многочисленных ионных и ароматических нековалентных связей с органическими катионами, что может делать виропорин чувствительной мишенью для этого типа соединений.

На заседании 4 декабря 2025 года диссертационный совет принял решение присудить Васюченко Е.П. ученую степень кандидата биологических наук.

Результаты первого тайного голосования не были утверждены в связи с допущенной технической ошибкой в процедуре голосования.

При проведении второго тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 8 докторов наук по специальности 1.5.2. Биофизика, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 16, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного совета

д.б.н., профессор, академик РАН

Рубин Андрей Борисович

Ученый секретарь

диссертационного совета

к.ф.-м.н.

Фурсова Полина Викторовна

04.12.2025