

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Ивонцина Леонида Андреевича** на тему:
«Молекулярно-динамическое моделирование протонных полуканалов бактериальной F_0F_1 -АТФсинтазы» по специальности 1.5.8. «Математическая биология, биоинформатика»
(физико-математические науки)

Диссертационная работа Ивонцина Л.А. посвящена молекулярно-динамическому моделированию полуканалов F_0F_1 -АТФсинтазы бактерий. В большинстве живых организмов ключевым ферментом, ответственным за получение энергии в форме АТФ, является АТФсинтаза, однако подробное описание механизма ее работы до конца еще не изучено, поэтому тема диссертационной работы представляется крайне актуальной. Следует подчеркнуть, что необходимость представленного исследования продиктована постоянно расширяющимся использованием методов молекулярного моделирования для анализа различных биологических систем. Описание структуры ключевого фермента окислительного фосфорилирования в митохондриях особенно важно, поскольку неотъемлемым свойством всех живых систем является способность образования энергии для обеспечения функционирования основных процессов.

Автореферат четко отражает актуальность и научную новизну работы, содержит все необходимые разделы: общая характеристика работы, содержание работы, заключение, а также список работ, опубликованных соискателем по теме диссертации. Принципиальных замечаний, касающихся формулировки задач, положений и выводов нет.

В диссертационной работе Ивонцина Л.А. проводится молекулярно-динамический анализ структуры протонных полуканалов F_0F_1 -АТФсинтазы *E. coli*. Автор подробно изучает и описывает структуру мембранной части фермента, а также обобщает полученные результаты в виде сети центров связывания протона, состоящей из полярных аминокислотных остатков и молекул воды.

Кроме перечисления центров, входящих в предполагаемый путь движения протона, автор выводит несколько важных закономерностей о структурно-функциональных свойствах полуканалов: отмечает области локализации структурных кластеров молекул воды, устойчивые пространственные положения отдельных аминокислотных остатков.

В работе приведено детальное описание возможного пути переноса протонов в мембранах с различным липидным составом, а также мутационный анализ существенных аминокислотных остатков, которые могут использоваться как в теоретических, так и в экспериментальных работах по дальнейшему изучению энергосинтезирующих систем клеток.

Изложение материалов проведенной соискателем работы проведено ясным языком, что дает возможность легко понять суть решаемых проблем, результаты и выводы

диссертации. Диссертация выполнена на высоком теоретическом уровне с использованием современных методов молекулярной динамики, программных пакетов. Результаты работы представлены на всероссийских и международных конференциях.

К недостаткам оформления автореферата следует отнести наличие мелких цветных деталей на рисунках, восприятие которых в данном формате затруднено. В подписях к некоторым рисункам нет расшифровки используемых сокращений (например, рис 2, рис 5). Также на рисунке 5В цветовых обозначений больше, чем указано в подписи к рисунку. Кроме того, в тексте аминокислоты указаны в виде трехбуквенного сокращения, но на рисунках используются однобуквенные обозначения. Также, к сожалению, в тексте часть сокращений и выражений приведены на английском языке (например, RMSD, CL, PE, in bulk), хотя аналоги существуют и в русском языке. Тем не менее, данные замечания не являются существенными.

Отмеченные недостатки не снижают ценность и высокий уровень работы. Автореферат позволяет сделать вывод, что диссертационная работа Ивонцина Леонида Андреевича является законченным научным исследованием, работа соответствует требованиям, предъявляемым Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к диссертациям, представленным на соискание ученой степени кандидата наук, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.8. «Математическая биология, биоинформатика» (физико-математические науки).

Генрихс Елизавета Евгеньевна,
кандидат биологических наук
03.03.04 – клеточная биология, цитология, гистология
старший научный сотрудник лаборатории нейробиологии
и тканевой инженерии Института мозга,
Федеральное государственное бюджетное научное
учреждение «Научный центр неврологии»
125367, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 80.
Тел.: {
E-mail: genrikhs@neurology.ru



Генрихс Е.

12.02.2025

Подпись сотрудника ФГБНУ НЦН
Генрихс Е.Е. удостоверяю:
руководитель/кадровый работник

✓

Генрихс Е.Е.
12.02.2025
Фамилия дата