

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)

Изучение механизмов регуляции процессов окислительного фосфорилирования можно рассматривать как одно из ключевых направлений в биомедицинских исследованиях. В связи с высокой функциональной сложностью теоретические подходы в данной области являются важнейшим звеном в системном анализе биологических закономерностей управления биоэнергетическими процессами в норме и патологии.

В диссертационной работе Ивонцина Л.А. рассматриваются вопросы молекулярно-динамического моделирования протонных полуканалов F_0F_1 -АТФсинтазы *E. coli*. С помощью методов атомистической молекулярной динамики описана структура входного и выходного полуканалов фермента, встроенного в мембраны с различным липидным составом.

На основе всестороннего анализа данных молекулярно-динамического моделирования субъединиц из кристаллической структуры АТФсинтазы диссертантом предложена последовательность полярных аминокислотных остатков и молекул воды, формирующих путь переноса протона внутри мембранной части белка. Выявлены такие структурные особенности полуканалов, как наличие лакун и узких участков, устойчивые пространственные положения отдельных аминокислот, структурные кластеры молекул воды.

Необходимо отметить, что одним из преимуществ проведенного автором подробного описания полуканалов АТФсинтазы *E. coli* является возможность экспериментального подтверждения полученных результатов при помощи мутационного анализа.

Автор предлагает в автореферате о возможности дальнейшего применения полученных результатов для диагностики и терапии патологических состояний, связанных с недостаточным энергетическим обеспечением клеток. Несмотря на то, что в диссертационной работе развитию этой темы не уделяется должного внимания, можно с уверенностью отметить перспективность данного направления для дальнейших научных исследований.

Насколько можно судить из автореферата диссертации, автор способен логично и обоснованно излагать свои мысли, проводить сравнительный анализ экспериментальных данных и критически анализировать результаты собственных исследований.

В целом работа Л.А. Ивонцина представляет собой законченное научное исследование. Содержание диссертации соответствует критериям, определенным Положением о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. Соискатель Ивонцин Леонид Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.8. «Математическая биология, биоинформатика» (физико-математические науки).

Шкурников Максим Юрьевич
доктор медицинских наук (3.3.3. Патологическая физиология),
заведующий лабораторией исследований молекулярных механизмов долголетия
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего
образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
Адрес места работы: 117418, г. Москва, Профсоюзная ул., д. 33, корп. 4
Тел.: +7 (_____) _____
E-mail: mshkurnikov@hse.ru



17.02.2025



Подпись доктора медицинских наук, заведующего лабораторией исследований молекулярных механизмов долголетия Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» Шкурникова Максима Юрьевича заверяю:



заверяю

ПО ПЕРСОНАЛУ
ИЯ ПЕРСОНАЛА
В Т.Д.