

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Суковатого Льва Алексеевича

«Молекулярно-динамический анализ влияния осмолитов на структуру бактериальных люцифераз»,
представленный на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.2
Биофизика.

Работа Суковатого Льва Алексеевича «Молекулярно-динамический анализ влияния осмолитов на структуру бактериальных люцифераз» посвящена исследованию влияния осмолитов относящихся к классам полиолов и сахаров на структуру и функции двух бактериальных люцифераз («быстрой» из *P. Leiofnathi* и «медленной» из *V. harveyi*) с применением методов молекулярно-динамического моделирования. Для определения степени влияния осмолитов в моделируемой системе использовался набор характеристик таких как компактность люциферазы, подвижность основной цепи, влияние осмолитов на гидратную оболочку люциферазы и другие параметры. Также была рассмотрена возможность проникновения осмолитов в активный центр люциферазы (в частности было показано, что в среднем за время молекулярной динамики в активном центре присутствуют молекулы осмолитов в значительных количествах), а так же влияние их наличия на конформацию и объём активного центра, что оказывает влияние на прохождение ферментативных реакций с участием люциферазы.

Научная новизна работы заключается в применении методологии молекулярной динамики в режиме свободной диффузии для изучения влияния низкомолекулярных компонент растворителя (в данной работе это осмолиты) на белок люциферазу. Данный подход позволил автору оценить влияние различных осмолитов на структуру и динамику исследуемых люцифераз.

В качестве замечания стоит привести тот факт, что в работе не указана какая концентрация ионов была использована для создания ионной силы в моделируемой системе, так как это может оказывать существенное влияние на поведение белков в моделируемой системе. Так же не была указана модель молекул воды используемая при расчётах молекулярной динамики, что так же может оказать существенное влияние на поведение молекулярной системы. Немаловажным фактором при проведении расчётов молекулярной динамики белков является их зарядовое состояние в системе, особенно в случае наличия на них групп способных изменять заряд в зависимости от pH. Тем не менее поставленные в данной работе задачи полностью решены, выводы соответствуют полученным данным и проведённому анализу. Результаты работы опубликованы в 8 научных публикациях в журналах, входящих в международные базы данных.

Работа соответствует требованиям Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842 «О порядке присуждения учёных степеней» (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.2 Биофизика.

Швецов Алексей Валерьевич,
кандидат физико-математических наук по специальности 03.01.02 Биофизика,
старший научный сотрудник группы вычислительных и нейтронно-синхротронных методов
структурной биологии лаборатории молекулярной биофизики и нейтронных исследований отдела молекулярной
и радиационной биофизики Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт
ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

188300, Ленинградская обл., г.Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ
(<https://www.pnpi.nrcki.ru/>)

Телефон: +7 [redacted] 15

E-mail: s [redacted] .ru

Я, Швецов Алексей Валерьевич, даю согласие на включение и дальнейшую обработку своих персональных
данных при подготовке документов аттестационного дела соискателя учёной степени
«22» января 2023 года

