

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертационной работы Коц Екатерины Дмитриевны
«Молекулярное моделирование механизмов регуляции
активности ферментов человека»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия

В работе представлены результаты исследования механизмов регуляции каталитической активности ферментов человека методами современного суперкомпьютерного молекулярного моделирования. Особенность данной работы состоит в том, что автор применяет самые разнообразные методические подходы для полного описания биофизических свойств ферментов.

В работе исследован полный каталитический цикл фермента аспартоацилазы; предложены аллостерические сайты самоактивации и самоингибирования этого фермента и описано влияние четвертичной структуры белка на ферментативную функцию. Основные выводы данной работы представлены в виде рассчитанной кинетической схемы системы аспартоацилаза – N-ацетиласпартат и находятся в согласии с экспериментальной кривой, опубликованной в литературе.

Результаты работы опубликованы в 10 статьях в рецензируемых научных изданиях, в том числе в высокорейтинговых международных изданиях, а также апробированы на российских и международных конференциях, что свидетельствует о высоком уровне проведенных исследований.

В качестве замечания можно отметить следующее: в качестве начального приближения геометрии системы для процесса образования комплекса аспартоацилазы с N-ацетиласпартатом в активном сайте взята система с открытыми воротами белка, что не соответствует кристаллографическим данным. Возможно именно конформационный переход является скоростью-определяющим в данном процессе.

Полнота проведенного исследования, научная новизна и апробация результатов позволяет считать, что диссертационная работа Коц Е.Д. полностью соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова, и соответствует паспорту специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия, а её автор, Коц Екатерина Дмитриевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Директор ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
член-корр. РАН, профессор
доктор химических наук (03.00.04)

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: vpopov@inbi.ras.ru

12.02.2018 г.