

## О Т З Ы В

на автореферат диссертационной работы Макарова Геннадия Ивановича «МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РИБОСОМНОГО ТУННЕЛЯ И ЕГО КОМПЛЕКСОВ С АНТИБИОТИКАМИ», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.10 – Биоорганическая химия

**Актуальность** работы для биоорганической химии определяется той ролью методов молекулярно-динамического моделирования, которую они играют в исследованиях структуры функциональных центров рибосом, выявлении особенностей движения нуклеотидных и аминокислотных остатков, изучении динамики их взаимодействий с антибиотиками. Молекулярно-динамическое моделирование восполняет недостающие этапы формирования объективных гипотез о влиянии структурной динамической подвижности на биохимические процессы.

Динамические особенности структуры рибосомного туннеля, по которому синтезируемый полипептид выходит в цитоплазму, являются ключевыми объектами диссертационной работы. **Научная и практическая значимость** работы кратко может быть выражена следующим образом: выполнено молекулярно-динамическое моделирование комплексов эритромицина, линезолида, клиндамицина, хлорамфеникола с субъединицей рибосомы, исследован механизм устойчивости бактериальной рибосомы к ряду антибиотиков; выявлены структурные причины аномальной биологической активности тилозина и его производных; установлена роль обратимого конформационного перехода в рРНК при описании механизмов передачи аллостерических сигналов.

Судя по приведенным в автореферате данным, а также по данным из прочитанных статей списка публикаций, диссертационная работа представляет собой оригинальное научное исследование.

Методы молекулярно-динамического моделирования, использованные автором, (силовые поля parm99sb, GAFF, программные пакеты PLUMED и GROMACS), а также специально разработанные программы, соответствуют поставленным задачам и подтверждаются согласием результатов вычислений с имеющимися экспериментальными данными. На основании анализа приведенного в автореферате материала можно заявить, что сформулированная цель работы автором достигнута, задачи выполнены методически качественно, автореферат написан научным языком высокого уровня.

В целом, диссертация представляет собой завершенную научно-исследовательскую работу на актуальную тему исследования особенностей взаимодействия рибосом с антибиотиками, с применением современных теоретических подходов. Результаты исследования могут быть использованы при разработке и конструировании новых лекарственных средств. Таким образом, работа удовлетворяет всем требованиям, установленным п. 9 Положения о порядке

присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, предъявляемым к кандидатской диссертации, а ее автор – Макаров Геннадий Иванович – заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.10 – Биоорганическая химия.

Отзыв подготовлен на кафедре теоретической и прикладной химии химического факультета ЮУрГУ, в лаборатории многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов.

Ф.И.О. составителя:

Барташевич Екатерина Владимировна

Почтовый адрес:

454080 Челябинск, пр. Ленина, 76

Телефон:

+7(351)2679564

Адрес электронной почты:

[bartashevichev@susu.ru](mailto:bartashevichev@susu.ru)

Наименование организации:

ФГБОУ ВО «Южно-Уральский  
государственный университет»  
(национальный исследовательский

Должность:

университет). Химический факультет  
Профессор кафедры теоретической и  
прикладной химии, д.х.н., доцент  
«18» июля 2016 г.



ВЕРНО

начальник службы  
производства ЮУрГУ  
Цмулина