

Заключение комиссии  
по диссертации Боздаганян Маринэ Евгеньевны  
на тему «Молекулярная динамика структурных перестроек в липидных бислоях»  
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности  
03.01.02 – «биофизика»

Комиссия диссертационного совета Д 501.001.96 в составе д.б.н. Булычева А.А., д.б.н. Максимова Г.В., д.ф.-м.н. Ризниченко Г.Ю. рассмотрела текст диссертации, основные публикации и проект автореферата.

Диссертационная работа посвящена изучению структурных перестроек в липидных бислоях методом молекулярной динамики.

В данной диссертационной работе впервые методом молекулярной динамики было показано спонтанное образование рафта в трехкомпонентных модельных мембранах, состоящих из ПОФХ, СМ и ХОЛ в соотношении 2:1:1. Была получена количественная оценка взаимодействия ПОФХ, СМ и ХОЛ между собой в модельной мембране, а также оценена энергия взаимодействия двух монослоев рафта при их различных сдвигах друг относительно друга. Согласно полученным данным, основные рафтообразующие липиды, СМ и ХОЛ, имеют энергию взаимодействия друг с другом ниже, чем остальные пары липидов. Показано, что изомеры фуллерена  $C_{60}$  ( $C_3$  и  $D_3$ ) не проникают внутрь бислоя, а остаются на его поверхности, но на разной глубине. Стереохимическое расположение малонатных группировок влияет на взаимодействие фуллеренов с мембраной: амфифильная молекула  $C_3$  оказывается глубже погруженной в липиды, чем молекула  $D_3$ . В работе впервые предложен новый механизм переноса протона, а также оценена энергия активации этого процесса. Согласно предложенной модели, протон присоединяется к фосфату липида, и в результате процесса «неполного флип-флопа» переносится на другую сторону мембраны уже фосфатом другого липида. В этом процессе участвуют также молекулы воды, которые выстраиваются по «кислородной лестнице», образованной кислородами липидов.

Результаты работы и предложенные методики расчета свободных энергий для модельных билипидных слоев представляют интерес для исследователей, занимающихся вопросами структуры биомембран и их перестройками.

Диссертация соответствует профилю совета. Основные материалы диссертации опубликованы. Всего автором опубликовано 14 работ, из них в рецензируемых российских и иностранных журналах, входящих в перечень ВАК – 4; тезисов докладов на научных конференциях – 10, 1 статья находится в печати.

Диссертационная работа Боздаганян М.Е. посвящена актуальной научной проблеме, имеет высокую теоретическую и практическую ценность и соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Комиссия считает, что диссертация может быть представлена к защите на совете по биофизике (специальность 03.01.02).

В качестве официальных оппонентов рекомендуются:

доктор физико-математических наук, профессор Крупянский Юрий Федорович, зам. директора по научной работе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химической физики им. Н.Н.Семенова Российской академии наук», г. Москва;

кандидат физико-математических наук, Волынский Павел Евгеньевич, ст.н.с. Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук», г. Москва.

На официальный отзыв диссертацию направить в Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт математических проблем биологии Российской академии наук», г. Пущино

Члены комиссии:

д.б.н. Булычев А.А.



---

д.б.н. Максимов Г.В.



---

д.ф.-м.н. Ризниченко Г.Ю.



---

«24» февраля 2016 г.