

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе и цифровому развитию

ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»

д. физ.-мат. наук, профессор

Алексей Александрович Короновский

« 29 » сентября 2026 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

по диссертации Ильичевой Полины Михайловны «Физико-химические основы и полноатомное моделирование формирования импринтированного альбумина» на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – «Физическая химия», выполненной на кафедре общей и неорганической химии ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

Тема диссертационной работы утверждена приказом ректора СГУ № 154-Д от 28 октября 2022 г., переутверждена приказом ректора СГУ № 165-Д от 1 сентября 2026 г.

Соискатель Ильичева Полина Михайловна окончила в 2022 году федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» с присвоением квалификации «Магистр».

В период подготовки диссертации с 2022 г. по настоящее время соискатель обучается в аспирантуре федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по группе научных специальностей 1.4 «Химические науки», направленность 1.4.4. - «Физическая химия». В настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории общей и неорганической химии ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

Справка об обучении № 62-2026 выдана 15.09.2026 г. федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского».

Научный руководитель – Бурмистрова Наталия Анатольевна, доктор химических наук, доцент, профессор кафедры общей и неорганической химии СГУ, утвержденный приказом ректора СГУ № 154-Д от 28 октября 2022 г. представила положительный отзыв о диссертации и соискателе.

Научную экспертизу диссертация проходила на расширенном заседании кафедры общей и неорганической химии Института химии ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» с приглашением специалистов по профилю диссертации из других структурных подразделений СГУ. На заседании присутствовали:

сотрудники кафедры общей и неорганической химии СГУ:

Горячева Ирина Юрьевна, д.х.н., заведующий кафедрой, профессор;

Бурмистрова Наталия Анатольевна, д.х.н., профессор, доцент;

Черкасов Дмитрий Геннадиевич, д.х.н., профессор, доцент;

Кузнецова Ирина Владимировна, к.х.н., доцент, доцент;

Маркин Алексей Викторович, к.х.н., доцент;

Пожаров Михаил Владимирович, к.х.н., доцент;

Смотров Максим Павлович, к.х.н., доцент;

Дрозд Даниил Дмитриевич, к.х.н., доцент;

Цюпка Дарья Владиславовна, к.х.н., доцент.

приглашённые специалисты по профилю диссертации:

сотрудник кафедры физической химии СГУ:

Ушаков Арсений Владимирович, к.х.н., доцент;

сотрудник базовой кафедры полимеров на базе ООО «Акрипол» СГУ:

Шиповская Анна Борисовна, д.х.н., заведующий кафедрой, профессор;

сотрудники кафедры аналитической химии и химической экологии СГУ:

Русанова Татьяна Юрьевна, д.х.н., заведующий кафедрой, доцент;

Штыков Сергей Николаевич, д.х.н., профессор, профессор;

Пиденко Павел Сергеевич, к.х.н., доцент;

сотрудники кафедры органической и биоорганической химии СГУ:

Кривенько Адель Павловна, д.х.н., профессор, профессор;

Гринев Вячеслав Сергеевич, д.х.н., профессор;

сотрудник кафедры нефтехимии и техногенной безопасности СГУ:

Кузьмина Раиса Ивановна, д.х.н., заведующий кафедрой, профессор;

Рецензенты диссертации:

Горячева Ирина Юрьевна, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и неорганической химии, представила положительный отзыв;

Маркин Алексей Викторович, кандидат химических наук, доцент кафедры общей и неорганической химии, представил положительный отзыв.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Выполненная Ильичевой П.М. диссертационная работа полностью соответствует требованиям пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842.

Личное участие автора в получении научных результатов заключалось в постановке задач, а также в выполнении основных теоретических и экспериментальных работ по ключевым направлениям исследования. В диссертации обобщены результаты, полученные лично автором и совместно с соавторами публикаций.

Степень достоверности результатов исследований, проведенных Ильичевой П.М. подтверждается применением комплекса современных физико-химических методов исследования и методов молекулярного моделирования, соответствием между полученными результатами, а также отсутствием противоречий с литературными данными, апробацией полученных данных на всероссийских и международных конференциях, публикацией основных положений диссертационного исследования в профильных высокорейтинговых реферируемых журналах.

Апробация работы. Основные результаты диссертационного исследования были представлены на всероссийских и международных конференциях: The 14th Winter Symposium on Chemometrics (Цахкадзор, Армения, 2024), XIII International Conference on Chemistry for Young Scientists "Mendeleev 2024" (Санкт-Петербург, Россия, 2024), XXIX Symposium "Bioinformatics and Computer-Aided Drug Discovery" (Москва, Россия, 2023), XXVII Saratov Fall Meeting 2023 (Саратов, Россия, 2023), X Международная конференция молодых ученых: биоинформатиков, биотехнологов, биофизиков, вирусологов и молекулярных биологов «OpenBio-2023» (Научоград Кольцово, Россия, 2023), Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине «BioMedSeminar» (Саратов, Россия, 2023), The 14th Scientific Conference for Young Scientists «Presenting Academic Achievements to the World» (Саратов, Россия, 2023).

Научная новизна исследования: все результаты работы получены впервые и не описаны ранее в научной литературе.

— Показано влияние предварительного изменения конформации белковой глобулы в кислой среде на сорбционные характеристики импринтированного бычьего сывороточного альбумина (БСА); установлен характер и степень влияния на сорбционную емкость и аффинность формируемых сайтов связывания импринтированного белка (ИБ);

— Получен полный термодинамический профиль процесса формирования ассоциата БСА с молекулой шаблона (4-гидроксикумарин) при различных значениях рН методом изотермической титрационной калориметрии (ИТК); показано, что в зависимости от значения рН связывание регулируется либо выраженным энтропийным вкладом гидрофобных взаимодействий, либо энтальпийной компенсацией при локальных электростатических контактах.

— Впервые предложена полноатомная модель формирования ассоциата БСА:4-гидроксикумарин в процессе импринтинга белка; проведено пространственное картирование сайтов связывания, описана природа и динамика межмолекулярных контактов; установлена взаимосвязь между соотношением реагентов при получении ИБ и степенью заселенности сайтов связывания.

Практическая значимость работы: полученные результаты имеют не только фундаментальную научную ценность, но и вносят вклад в развитие технологии получения ИБ.

— Разработан и апробирован подход к полноатомному моделированию структуры ассоциатов белок:молекула-шаблон для исследования физико-химических основ формирования ИБ; показана возможность применения предложенного подхода для прогнозирования сорбционных характеристик ИБ разного состава;

— Показана возможность увеличения сорбционной емкости ИБ путем направленного изменения конформации белковой матрицы в процессе его получения на примере импринтированного БСА;

— Предложен подход к прогнозированию оптимального молярного соотношения белок:молекула-шаблон, позволяющий выбрать условия получения ИБ с более высокой сорбционной емкостью;

— Предложен подход к прогнозированию оптимального времени очистки белковой матрицы от молекул-шаблонов на основе хемотретрического анализа трехмерных спектров флуоресценции, позволяющий проводить мониторинг процесса очистки ИБ.

Ценность научных работ подтверждается опубликованием результатов в журналах из перечня ВАК и в международных рецензируемых журналах: «Polymers», «Biosensors», «Analytical and Bioanalytical Chemistry», «Russian Journal of General Chemistry», «Journal of Chemometrics», «Molecular Systems Design & Engineering», «Microchimica Acta», «Журнал аналитической химии», «Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика».

Полнота изложения материалов диссертации отмечается в работах, опубликованных соискателем. По материалам диссертации опубликовано 13

работ, в их числе 9 статей в журналах, рекомендуемых ВАК, 4 статьи в сборниках.

Статьи в журналах из перечня ВАК:

1. **Ilicheva, P.M.** Toward Rational Design of Imprinted Proteins Based on Albumins: Computational and Experimental Studies / **P.M. Ilicheva**, A.L. Kwiatkowski, I.A. Reshetnik, K.Y. Presnyakov, I.E. Menyailo, M.V. Pozharov, P.S. Pidenko, Y.B. Monakhova, O.E. Philippova, N.A. Burmistrova // *Polymers*. — 2026. — № 11 (18). — P. 1280.

Личный вклад соискателя: соискателем разработана общая концепция исследования, проведено компьютерное моделирование (молекулярный докинг и молекулярная динамика для системы БСА-4-гидроксикумарин), обобщены термодинамические закономерности формирования ассоциата белок:молекула-шаблон, сформулирован и обоснован прогностический критерий для выбора оптимального молярного соотношения компонентов при получении импринтированных белков, подготовлен и оформлен основной текст публикации.

2. Presnyakov, K.Y. Imprinted Proteins as a Receptor in Fluorescent Sensing Microplate Assay for Herbicide Determination / K.Y. Presnyakov, I.S. Matlakhov, I.A. Reshetnik, **P.M. Ilicheva**, D.V. Tsyupka, D.G. Koganova, S.A. Mescheryakova, T.Y. Rusanova, M.V. Pozharov, D.D. Drozd, P.S. Pidenko, I.Y. Goryacheva, N.A. Burmistrova // *Biosensors*. — 2026. — № 3 (16). — P.149.

Личный вклад соискателя: соискателем построена полноатомная модель ассоциата бычий сывороточный альбумин:имазамокс в условиях импринтинга, выбрано теоретически оптимальное молярное соотношение белок:молекула-шаблон для проведения эксперимента и подготовлен соответствующий раздел рукописи.

3. Presnyakov, K.Y. A novel approach to determination of amino acids and cyclic heptapeptides using imprinted proteins / K.Y. Presnyakov, **P.M. Ilicheva**, I.A. Reshetnik, M.V. Pozharov, P.S. Pidenko, N.A. Burmistrova // *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. — 2026. — (418). — P. 587-596.

Личный вклад соискателя: соискателем построены модели ассоциатов белок:молекула-шаблон, выполнен детальный сравнительный анализ центров связывания, на основе которого показана возможность замены токсичных молекул-шаблонов их структурными аналогами/фрагментами; подготовлен соответствующий раздел рукописи.

4. **Ilicheva, P.M.** Molecularly Imprinted Polymers in Drug Delivery Systems / **P.M. Ilicheva**, P.S. Pidenko, N.A. Burmistrova in *Modern Strategies of Drug Therapy: Multi-Target Drug Delivery, Bioimaging, Diagnostics* // *Russian Journal of General Chemistry*. — 2025. — (95). — P. S1-S448.

Личный вклад соискателя: соискателем написан и подготовлен к публикации тематический подраздел коллективного обзора, посвященный методологии молекулярного импринтинга, особенностям использования данных материалов в качестве систем селективного связывания для доставки

лекарств и применению компьютерного моделирования для направленной разработки таких систем.

5. **Ilicheva P. M.** Characterization of imprinted albumin by molecular modelling and spectroscopy / **P.M. Ilicheva**, I.A. Reshetnik, D.D. Drozd, P.S. Pidenko, N.A. Burmistrova // Известия Саратовского университета. Серия Физика. — 2025. — №2 (25). — С. 222-229.

Личный вклад соискателя: соискателем проведен расчет поверхности свободной энергии конформационных переходов БСА методом метадинамики, проведен анализ спектральных данных и подготовлен текст рукописи.

6. Пресняков К.Ю. Применение фиктивных аналогов для получения бионеорганического сорбента, модифицированного импринтированными белками / К.Ю. Пресняков, **П.М. Ильичева**, Д.В. Цюпка, И.Е. Меняйло, Н.А. Бурмистрова, П.С. Пиденко // Журнал аналитической химии. — 2025. — № 10 (80). — С. 1687–1696.

Личный вклад соискателя: соискателем рассчитана полноатомная модель ассоциатов белок:молекула-шаблон и осуществлено физико-химическое обоснование выбора 4-гидроксикумарина в качестве безопасного фиктивного шаблона, соискатель участвовала в написании и научном редактировании рукописи.

7. Burmistrova, N.A. 3D Fluorescence Spectroscopy Combined With Chemometrics as a Tool for Control of Imprinted Protein Purification From Template Molecules / N.A. Burmistrova, **P.M. Ilicheva**, K.Y. Presnyakov, P.S. Pidenko, D.N. Rutledge // Journal of Chemometrics. — 2024. — № 12 (38). — P. e3622.

Личный вклад соискателя: соискателем осуществлена предварительная математическая обработка спектральных массивов (ЕЕМ), проведен расчет и сопоставление хеометрических алгоритмов деконволюции сигналов (РСА, ICA и PARAFAC), выполнена физико-химическая интерпретация выделенных спектральных факторов и кинетического профиля десорбции 4-гидроксикумарина, подготовлена исходная версия рукописи.

8. **Ilicheva P. M.** Theoretical design of imprinted albumin against foodborne toxins / **P.M. Ilicheva**, E.S. Fedotova, K.Y. Presnyakov, V.S. Grinev, P.S. Pidenko, N.A. Burmistrova // Molecular Systems Design & Engineering. — 2024. — №5 (9). — P. 456-463.

Личный вклад соискателя: соискателем проведены измерения методами кругового дихроизма и флуоресценции, соискателем проведен ретроспективный анализ импринтированных систем на основе альбумина, представленных в литературе, спланирован и реализован протокол компьютерного моделирования первых этапов импринтинга, проведены расчеты методами молекулярного докинга и молекулярной динамики ассоциатов бычьего сывороточного альбумина с низкомолекулярными токсинами, установлена количественная взаимосвязь между отклонением фактического молярного соотношения белок:молекула-шаблон, используемого авторами, при получении импринтированных белков от теоретически оптимального и результирующей эффективностью

импринтинга, исследованы структурные перестройки белкового остова в ответ на ассоциацию, написан основной текст рукописи.

9. Presnyakov, K.Y. Dummy-template imprinted bovine serum albumin for extraction of zearalenone / K.Y. Presnyakov, **P.M. Ilicheva**, D.V. Tsyupka, E.A. Khudina, M.V. Pozharov, P.S. Pidenko, N.A. Burmistrova // *Microchimica Acta*. — 2024. — №12 (191). — P. 767.

Личный вклад соискателя: соискателем проведено молекулярно-динамическое моделирование и расчет энергии связывания целевого и фиктивного шаблонов (зеараленон и 4-гидроксикумарин) на поверхности бычьего сывороточного альбумина, выполнен детальный сравнительный анализ центров связывания, проведена интерпретация результатов моделирования, соискатель принимала участие в подготовке текста рукописи.

Выполненная работа относится к следующим пунктам паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия по отрасли наук «Химические науки»:
1 – Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик, 3 – Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях, 4 – Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования, 11 – Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении, 12 – Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.

Диссертация «Физико-химические основы и полноатомное моделирование формирования импринтированного альбумина» Ильичевой Полины Михайловны рекомендуется к защите на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия как удовлетворяющая критериям, установленным «Положением о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры общей и неорганической химии Института химии ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» с приглашением специалистов по профилю диссертации из других структурных подразделений СГУ.

Присутствовало на заседании 9 докторов наук и 8 кандидатов наук по профилю диссертации. Результаты открытого голосования: «за» – 17 чел.; «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел. (протокол № 2 от 17 сентября 2026 г.).

Председатель заседания:

Заведующий кафедрой общей и неорганической химии

Института химии ФГБОУ ВО

«СГУ имени Н.Г. Чернышевского»,

доктор химических наук, профессор

Горячева Ирина Юрьевна

Горячева

