

Заключение диссертационного совета МГУ.03.02
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «13» декабря 2018 г. № 16

О присуждении Армееву Григорию Алексеевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Определение структуры нуклеосом и их комплексов с белками хроматина методами молекулярного моделирования» по специальности 03.01.09 - «математическая биология, биоинформатика» принята к защите диссертационным советом 01.11.2018 г., протокол № 13.

Соискатель - Армеев Григорий Алексеевич, 1990 года рождения, в 2018 году соискатель окончил аспирантуру биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» (МГУ имени М.В. Ломоносова).

Соискатель работает младшим научным сотрудником в МГУ имени М.В. Ломоносова. Диссертация выполнена на кафедре биоинженерии биологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научные руководители – Шайтан Алексей Константинович, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры биоинженерии биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», Шайтан Константин Вольдемарович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры биоинженерии биологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

Головин Андрей Викторович, доктор химических наук, профессор факультета биоинженерии и биоинформатики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Балабаев Николай Кириллович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник Института математических проблем биологии РАН — филиала Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

Ефремов Роман Гербертович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт биоорганической химии имени М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова Российской академии наук

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 10 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 10 работ, из них 10 статей, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 03.01.09 -«математическая биология, биоинформатика»:

1. Valieva ME, Armeev GA, Kudryashova KS, Gerasimova NS, Shaytan AK, Kulaeva OI, McCullough LL, Formosa T, Georgiev PG, Kirpichnikov MP, Studitsky VM, Feofanov AV / Large-scale ATP-independent nucleosome unfolding by a histone chaperone // Nature Structural & Molecular Biology. Vol. 23, № 12.: 1111–1116, 2016.
2. Армеев Г.А., Шайтан К.В., Шайтан А.К. / Релаксация структуры нуклеосомы при отворачивании ДНК: исследование методом молекулярной динамики // Вестник Московского университета. Серия 16. Биология.(3): 34-37, 2016.
3. Армеев Г.А., Горковец Т. К., Ефимова Д.А., Шайтан К.В., Шайтан А.К. / Моделирование структуры ДНК-белковых комплексов с использованием экспериментальных данных по резонансному переносу энергии и перекисному окислению // Вестник Московского университета. Серия 16: Биология, (1): 35–40, 2016.
4. Shaytan AK, Armeev GA, Goncarenko A, Zhurkin VB, Landsman D, Panchenko AR / Coupling between Histone Conformations and DNA Geometry in Nucleosomes on a Microsecond Timescale: Atomistic Insights into Nucleosome Functions // Journal of Molecular Biology. 2016.
5. Shaytan AK, Xiao H, Armeev GA, Wu C, Landsman D, Panchenko AR / Hydroxyl-radical footprinting combined with molecular modeling identifies unique features of dna conformation and nucleosome positioning // Nucleic Acids Research. 2017.

6. Shaytan AK, Xiao H, Armeev GA, Gaykalova DA, Komarova GA, Wu C, Studitsky VM, Landsman D, Panchenko AR / Structural interpretation of DNA-protein hydroxyl-radical footprinting experiments with high resolution using HYDROID // Nature Protocols. 2018.

На автореферат поступило 2 отзыва, оба положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высоким уровнем компетентности в области математической биологии и биоинформатики и наличием публикаций в ведущих российских и международных журналах в этой сфере исследований.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задач, имеющих существенное значение для математической биологии и биоинформатики, а именно:

1. В работе показана стабильность молекулярных моделей нуклеосом на рекордных временах моделирования до 1 мкс, показано влияние ионного окружения и распределения поверхностных зарядов гистонов на процесс откручивания ДНК.

2. В работе предложена оригинальная методика создания моделей комплексов ДНК-белок. Данная методика может быть использована для построения начальных моделей при изучении структуры и динамики крупных молекулярных комплексов с помощью лазеров на свободных электронах. Методика также может быть применена для проверки и дополнения данных, связанных со структурой и динамикой макромолекул.

Работа является новаторской, а полученные результаты имеют теоретическую и практическую значимость.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Полноатомная молекулярная динамика позволяет выявлять и исследовать функционально-важную подвижность структуры нуклеосом;
2. Разработанный метод молекулярного моделирования позволяет реконструировать нуклеосомы и их комплексы по данным молекулярной спектроскопии FRET и гидроксильного футпринтинга;

3. Модели нуклеосом, взаимодействующих с гистоновым шапероном FACT, а также модели компактных динуклеосом, построенные методами интегративного моделирования, отличаются большей степенью откручивания ДНК, чем одиночные нуклеосомы.

На заседании 13.12.2018 года диссертационный совет принял решение присудить Армееву Григорию Алексеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 8 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации 03.01.09 - «Математическая биология, биоинформатика», участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» - 17, «против» - 0, «недействительных бюллетеней» - 0.

Председатель диссертационного совета

д.б.н., проф., член-корр. РАН



Рубин А.Б.

Ученый секретарь

диссертационного совета, д.б.н.

Страховская М.Г.

13.12.2018 г.