

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Шайтана Алексея Константиновича
«Интегративное моделирование структуры и динамики
биомакромолекулярных комплексов», представленной на соискание
ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности 03.01.09 – «Математическая биология, биоинформатика»**

Диссертация Шайтана А.К. посвящена развитию новых методов моделирования биомакромолекул и их комплексов с целью установления их структуры, динамики и в конечном счете механизмов их функционирования. Понимание структурно-динамических основ функционирования живых организмов на молекулярном уровне является одной из важных задач как фундаментальной биологии, так и прикладных биомедицинских наук. Наше представление о структурной организации биологической материи на атомистическом уровне ограничено в основном небольшими белками и небольшими комплексами белков из-за ограничений существующих методов структурной биологии. Поэтому крайне актуальным является развитие различных экспериментальных и вычислительных методов, позволяющих расширить доступный для анализа диапазон масштабов биомолекулярных систем. В данной диссертационной работе как раз развит набор таких подходов, основанных как на моделировании физических взаимодействий между атомами в биологических системах, так и на основе численного анализа данных различных экспериментальных методов.

Автором разработаны оригинальные подходы к интегративному моделированию ДНК-белковых комплексов и амилоидных фибрилл, позволяющие устанавливать их структуру и свойства в ранее не известных состояниях. Проведенные автором исследования позволили изучить динамическое поведение нуклеосом, определить структуру ранее неизвестных нуклеосом, различных комплексов нуклеосом с белками хроматина. Результаты исследований имеют ряд практических применений, что подтверждается наличием патента на способ скрининга потенциальных противоопухолевых препаратов. С помощью разработанных автором методов установлена структура амилоидоподобных фибрилл, состоящих их фрагментов белка gp120 вируса иммунодефицита человека и являющихся перспективным агентом для ускорения трансфекции вирусных векторов с целью геномного редактирования.

Считаю, что методы интегративного моделирования, развитые автором, являются перспективными для решения широкого круга фундаментальных и прикладных задач, в том числе и в биомедицинских исследованиях.

Работа выполнена на высоком современном методическом уровне, результаты исследования опубликованы в 35 статьях в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, многократно докладывались на международных и российских конференциях.

Принципиальных замечаний по автореферату диссертации не имею.

Исходя из анализа представленного автореферата, можно сделать вывод, что диссертационная работа «Интегративное моделирование структуры и динамики биомакромолекулярных комплексов» является законченной научно-квалификационной работой, в которой развит и успешно применен новый научный подход для решения важных задач в области вычислительной биологии.

Считаю, что диссертационная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертационным работам, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 03.01.09 – «Математическая биология, биоинформатика».

Доктор биологических наук
(03.01.09 – Математическая биология, биоинформатика),
главный научный сотрудник группы биобанкинга
Федерального государственного бюджетного
научного учреждения «Научно-исследовательский
институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»,
академик РАН

Андрей Валерьевич Лисица

01.03.2021

Контактные данные:

Адрес: 119121, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича», гор. Москва, ул. Погодинская, д.10, стр. 8. Телефон: (499) 246-69-80, (499) 246-34-66, электронная почта: inst@ibmc.msk.ru, тел/факс: (499) 245-08-57. Официальный сайт организации: <http://www.ibmc.msu.ru>