

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»

Методы молекулярного моделирования активно применяются в биологии при изучении функционирования биомолекулярных систем и разработке новых функциональных структур на основе биомолекул и их взаимодействий. Целый ряд достижений последнего времени по созданию новых лекарственных средств и дизайну ферментов связаны с применением методов молекулярного моделирования. При этом чем больше молекулярная система, тем труднее проводить молекулярное моделирование и добиться описания ее поведения на необходимом качественном уровне. В этой связи следует отметить актуальность выбранной темы диссертационной работы А.К. Шайтана и высокий класс проведенных исследований, приведших к расширению границ применимости методов компьютерного молекулярного моделирования для изучения сложных биомолекулярных комплексов.

В диссертационной работе автором развиты как подходы на основе традиционного метода молекулярной динамики, так и методы огрубленного и интегративного моделирования, позволяющие сочетать описание молекулярных систем с различным уровнем детализации и дополнительно учитывать различные экспериментальные данные при построении моделей. Особенно хочется выделить результаты работы, связанные с рекордными по длительности суперкомпьютерными расчетами поведения нуклеосом методами полноатомной молекулярной динамики. Используя возможности суперкомпьютера Ломоносов-2, автору удалось достигнуть времен моделирования более 10 микросекунд, что позволило охарактеризовать кинетику ранее неизвестных конформационных переходов в этом важнейшем для живых систем ДНК-белковом комплексе. Автор впервые показал существование конформационных переходов, связанных с частичной диссоциацией и реассоциацией ДНК в нуклеосоме. Последующее изучение кинетики и механизмов данных переходов было ключевым для понимания механизмов эпигенетической регуляции экспрессии генов в хроматине, а также построения более сложных кинетических моделей, описывающих функционирования генетических сетей в клетках.

Автореферат и опубликованные автором работы в ведущих международных журналах свидетельствуют о том, что диссертация А.К. Шайтана представляет исследование, выполненное на высоком научном и методическом уровне. Разработан важный класс подходов для решения актуальных задач молекулярной биологии и биоинженерии. Результаты работы хорошо известны научной общественности, были представлены на авторитетных международных и российских конференциях.

Существенных замечаний по автореферату диссертации не имею.

На основании изучения автореферата считаю, что диссертационная работа Алексея Константиновича Шайтана «Интегративное моделирование структуры и динамики биомакромолекулярных комплексов» 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 химических наук
(03.01.08 – Биоинженерия),
Профессор факультета биоинженерии и биоинформатики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова"

Витаутас-Юозапас Каятоно Швядас

Контактные данные.

Адрес: 119234, факультет биоинженерии и биоинформатики, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова", гор. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, 1, стр. 73.
Телефон: (495) 939-23-55, электронная почта: vytas@belozersky.msu.ru,
тел/факс: (495) 939-46-53. Официальный сайт организации:
<http://www.fbb.msu.ru>