

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»**

Диссертационная работа А.К. Шайтана посвящена разработке новых подходов к моделированию ряда сложных биомакромолекулярных систем, таких как амилоидные и амилоидоподобные фибриллы, комплексы ДНК с ключевыми белками хроматина. Актуальность развития новых подходов для изучения структуры и динамики комплексов биомолекул не вызывает сомнения. Современные методы структурной биологии такие как рентгеновская кристаллография, ЯМР, крио-электронная микроскопия, позволили изучить структуры многих отдельных белков и их стабильных комплексов. Однако огромное число функциональных взаимодействий в живых системах основано на образовании динамических молекулярных комплексов, которые могут быть лишь условно стабильны при выполнении определенных условий, а также демонстрировать существенный структурный полиморфизм. Использование интегративных подходов, развитых в работе, сочетающих подходы атомистического и огрубленного моделирования с возможностью использования разнородных экспериментальных данных является безусловно перспективным направлением.

В работе автором успешно продемонстрировано применение подходов интегративного моделирования не только для изучения природных систем, но и для решения прикладных биотехнологических задач. В частности, исследованы структуры и функциональные свойства различных синтетических самособирающихся амилоидоподобных фибрилл. Показано, что на основе гибридных соединений, состоящих из пептидов и синтетических полимеров тиофенов, можно создавать линейные структуры «нанопровода», обладающие

проводимостью за счет взаимодействия сопряженных проводящих групп тиофенов. Работы по анализу фибрилл, образуемых фрагментами белка gp120 вируса иммунодефицита человека, привели к созданию нового класса агентов, ускоряющих трансдукцию генетического материала с помощью ретровирусных векторов, что имеет перспективы применения как в лабораторной практике, так и в клинике для целей генетической терапии.

Следует также отметить высокий уровень публикаций по теме диссертационной работы. Более трети статей опубликованы в журналах с $IF > 5$, а некоторые в таких престижных как ACSNano и Nature Nanotechnology.

В результате анализа автореферата считаю, что диссертационная работа А.К. Шайтана выполнена на высоком методическом уровне, в работе автором развиты новые важные научные подходы, получены ценные научные результаты. 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».

Научный руководитель Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»,
профессор, академик РАН

ПОПОВ Влад

Доктор химических наук

4 – биохимия)

Контактные

Адрес: 119071, Москва, ул. Ленинский проспект, 33, стр.2

Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»
тел.: +7 (495) 952-34-41, e-mail: vpopov@fbras.ru