

**ОТЗЫВ на автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
Федуловой Анастасии Сергеевны  
на тему: «Исследование механизмов динамики ДНК-гистоновых  
комплексов методами молекулярного моделирования»  
по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика**

Работа Федуловой А.С. посвящена детальному изучению динамической структуры ДНК-гистоновых комплексов методами молекулярного моделирования. Тему следует признать актуальной, поскольку понимание механизмов регуляции работы генома вряд ли возможно без ясного представления о межмолекулярных взаимодействиях и структурных перестройках ДНК в составе нуклеосомы. Основные выводы сделаны на основе анализа траекторий равновесной молекулярной динамики на мульти-микросекундной шкале времени с использованием современных силовых полей.

Ключевым результатом явилось наблюдение функционально важных движений нуклеосомной ДНК в полученных траекториях – так называемого откручивания и скольжения. Далее было проведено систематическое исследование пластичности гистонов, ассоциированных с данными процессами, установлено влияние аминокислотной последовательности на конформационную подвижность. В частности, установлена важность изгиба  $\alpha 2$ -спиралей, образующих мотив «рукопожатие». Это позволило предложить молекулярный механизм связи динамики гистонов с откручиванием и скольжением ДНК. Полученные результаты обобщены в 5 выводах, которые соответствуют целям и задачам исследования, и представлены в 6 публикациях в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базе ядра РИНЦ.

Каких-либо серьезных замечаний по работе нет. Из автореферата следует, что важным методом работы явился «анализ главных компонент». На мой взгляд, в автореферате стоило бы дать краткое описание данного метода (т.к. он все же не настолько широко используется в области молекулярного моделирования, чтобы считаться общеизвестным), а также привести название соответствующей используемой программы.

Автореферат диссертации отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным

пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. Диссертационное исследование оформлено согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Федулова А.С. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

Кандидат химических наук,  
ведущий научный сотрудник  
научно-исследовательского института  
физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского  
федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Московский государственный университет  
имени М.В. Ломоносова»

НИЛОВ Дмитрий Константинович

31 марта 2026 г.

Контактные данные:

Тел.: +; e-mail:

Адрес места работы:

119234, г. Москва, Ленинские Горы, д.1, стр.40  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского

Подпись сотрудника НИИ физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского  
Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова  
Д.К. Нилова удостоверяю:

Зам. директора по общим вопросам

Д.А. Матвеев

31 марта 2026 г.