

**Сведения о научном руководителе
по диссертации Федуловой Анастасии Сергеевны
«Исследование механизмов динамики ДНК-гистоновых комплексов методами
молекулярного моделирования»**

Научный руководитель: Шайтан Алексей Константинович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: член-корреспондент РАН

Научная специальность: 03.01.09 - Математическая биология, биоинформатика (физ.-мат. науки)

Основное место работы:

Должность: профессор

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», биологический факультет, кафедра биоинженерии

Адрес места работы: 119234, Россия, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, Биологический факультет МГУ.

По совместительству:

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», Исследовательский центр в сфере искусственного интеллекта

Адрес места работы: 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1.

По совместительству:

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт биологии гена» Российской академии наук

Адрес места работы: 119334, город Москва, улица Вавилова, дом 34/5

По совместительству:

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение наук Институт общей генетики им. Н.И. Вавилова Российской академии наук

Адрес места работы: 119991, ГСП-1, Москва, ул. Губкина, д. 3

По совместительству:

Должность: профессор

Место работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет компьютерных наук

Адрес места работы: 101000, г. Москва, ул. Мясницкая, д. 20

Тел.: +7 (495) 939-59-65

E-mail: shaytan_ak@mail.bio.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика за последние 5 лет:

1. Amaro, R. E., Åqvist, J., Bahar, I., Battistini, F., Bellaiche, A., Beltran, D., Biggin, P. C., Bonomi, M., Bowman, G. R., Bryce, R. A., Bussi, G., Carloni, P., Case, D. A., Cavalli, A., Chang, C.-E. A., Cheatham, T. E., Cheung, M. S., Chipot, C., Chong, L. T., Choudhary, P., Cisneros, G. A., Clementi, C., Collepardo-Guevara, R., Coveney, P., Covino, R., Crawford, T. D., Dal Peraro, M., de Groot, B. L., Delemotte, L., De Vivo, M., Essex, J. W., Fraternali, F., Gao, J., Gelpí, J. L., Gervasio, F. L., González-Nilo, F. D., Grubmüller, H., Guenza, M. G., Guzman, H. V., Harris, S., Head-Gordon, T., Hernandez, R., Hospital, A., Huang, N., Huang, X., Hummer, G., Iglesias-Fernández, J., Jensen, J. H., Jha, S., Jiao, W., Jorgensen, W. L., Kamerlin Shina, C. L., Khalid, S., Laughton, C., Levitt, M., Limongelli, V., Lindahl, E., Lindorff-Larsen, K., Loverde, S., Lundborg, M., Luo, Y. L., Luque, F. J., Lynch, C. I., MacKerell, A. D., Magistrato, A., Marrink, S. J., Martin, H., McCammon, J. A., Merz, K., Moliner, V., Mulholland, A. J., Murad, S., Naganathan, A. N., Nangia, S., Noe, F., Noy, A., Oláh, J., O'Mara, M. L., Ondrechen, M. J., Onuchic, J. N., Onufriev, A., Osuna, S., Palermo, G., Panchenko, A. R., Pantano, S., Parish, C., Parrinello, M., Perez, A., Perez-Acle, T., Perilla, J. R., Pettitt, B. M., Pietropaolo, A., Piquemal, J.-P., Poma, A. B., Praprotnik, M., Ramos, M. J., Ren, P., Reuter, N., Roitberg, A., Rosta, E., Rovira, C., Roux, B., Rothlisberger, U., Sanbonmatsu, K. Y., Schlick, T., Shaytan, A. K., Simmerling, C., Smith, J. C., Sugita, Y., Świderek, K., Taiji, M., Tao, P., Tieleman, D. P., Tikhonova, I. G., Tirado-Rives, J., Tuñón, I., van der Kamp, M. W., van der Spoel, D., Velankar, S., Voth, G. A., Wade, R., Warshel, A., Welborn, V. V., Wetmore, S. D., Wheeler, T. J., Wong, C. F., Yang, L.-W., Zacharias, M., Orozco, M. The need to implement fair principles in biomolecular simulations // *Nature Methods* – 2025 – Vol. 22. – P. 641–645. DOI 10.1038/s41592-025-02635-0.
2. Xiangyan, S., Fedulova, A. S., Kotova, E. Y., Maluchenko, N. V., Armeev, G. A., Chen, Q., Prasanna, C., Sivkina, A. L., Feofanov, A. V., Kirpichnikov, M. P., Nordensköld, L., Shaytan, A. K., Studitsky, V. M. Histone tetrasome dynamics affects chromatin transcription // *Nucleic Acids Research* – 2025 – Vol. 53, No. 8. – gkaf356. DOI 10.1093/nar/gkaf356.
3. Fedulova, A. S., Armeev, G. A., Romanova, T. A., Singh-Palchevskaia, L., Kosarim, N. A., Motorin, N. A., Komarova, G. A., Shaytan, A. K. Molecular dynamics simulations of nucleosomes are coming of age // *Wiley interdisciplinary*

reviews. Computational molecular science – 2024 – Vol. 14, No. 4. – e1728. DOI 10.1002/wcms.1728

4. Seal, R. L., Denny, P., Bruford, E. A., Gribkova, A. K., Landsman, D., Marzluff, W. F., McAndrews, M., Panchenko, A. R., Shaytan, A. K., Talbert, P. B. A standardized nomenclature for mammalian histone genes // Epigenetics and Chromatin – 2022 – Vol. 15, No. 34. DOI 10.1186/s13072-022-00467-2.
5. Armeev, G. A., Kniazeva (Fedulova), A. S., Komarova, G. A., Kirpichnikov, M. P., Shaytan, A. K. Histone dynamics mediate dna unwrapping and sliding in nucleosomes // Nature communications – 2021 – Vol. 12. – P. 2387. DOI 10.1038/s41467-021-22636-9

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.015.5,
П.В. Фурсова

Подпись, печать