

На правах рукописи



Sign

Шайтан Алексей Константинович

**Интегративное моделирование структуры и динамики
биомакромолекулярных комплексов**

Специальность 03.01.09 —
«Математическая биология, биоинформатика»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Москва — 2020

Работа выполнена в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова.

Научный консультант: д-р биол. наук, академик РАН
Кирпичников Михаил Петрович

Официальные оппоненты: **Фамилия Имя Отчество,**
доктор физико-математических наук, профес-
сор,
Не очень длинное название для места работы,
старший научный сотрудник

Фамилия Имя Отчество,
кандидат физико-математических наук,
Основное место работы с длинным длинным
длинным длинным названием,
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное об-
разовательное учреждение высшего професси-
онального образования с длинным длинным
длинным длинным названием

Защита состоится **DD mmmmmmmmm** **YYYY** г. в **XX** часов на заседании
диссертационного совета Д 501.001.96 при Московского государственного
университета имени М.В.Ломоносова по адресу: 119234, Россия, Москва,
Ленинские Горы 1/24, МГУ, Биологический факультет, кафедра биофизи-
ки, аудитория 108 «Новая».

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке отделе диссертаций на-
учной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д.
27) и на сайте ИАС "ИСТИНА" <http://istina.msu.ru/dissertations/NNNNN/>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учре-
ждения, просьба направлять по адресу: 119234, Россия, Москва, Ленинские
Горы 1/24, МГУ, Биологический факультет, кафедра биофизики, аудито-
рия 108 «Новая», ученому секретарю диссертационного совета Д 501.001.96.

Автореферат разослан **DD mmmmmmmmm** 2020 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 501.001.96,
д-р биол. наук

Sign

Страховская Марина Глебовна

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Обзор, введение в тему, обозначение места данной работы в мировых исследованиях и т. п., можно использовать ссылки на другие работы [1; 2] (если их нет, то в автореферате автоматически пропадёт раздел «Список литературы»)[A1]. Внимание! Ссылки на другие работы в разделе общей характеристики работы можно использовать только при использовании `biblatex` (из-за технических ограничений `bibtex8`). Это связано с тем, что одна и та же характеристика используются и в тексте диссертации, и в автореферате. В последнем, согласно ГОСТ, должен присутствовать список работ автора по теме диссертации, а `bibtex8` не умеет выводить в одном файле два списка литературы). При использовании `biblatex` возможно использование исключительно в автореферате подстрочных ссылок для других работ командой `\autocite`, а также цитирование собственных работ командой `\cite`. Для этого в файле `common/setup.tex` необходимо присвоить положительное значение счётчику `\setcounter{usefootcite}{1}`. Много цитат здесь [2—41] Для генерации содержимого титульного листа автореферата, диссертации и презентации используются данные из файла `common/data.tex`. Если, например, вы меняете название диссертации, то оно автоматически появится в итоговых файлах после очередного запуска `LaTeX`. Согласно ГОСТ 7.0.11-2011 «5.1.1 Титульный лист является первой страницей диссертации, служит источником информации, необходимой для обработки и поиска документа». Наличие логотипа организации на титульном листе упрощает обработку и поиск, для этого разметите логотип вашей организации в папке `images` в формате PDF (лучше найти его в векторном варианте, чтобы он хорошо смотрелся при печати) под именем `logo.pdf`. Настроить размер изображения с логотипом можно в соответствующих местах файлов `title.tex` отдельно для диссертации и автореферата. Если вам логотип не нужен, то просто удалите файл с логотипом.

Этот абзац появляется только в автореферате. Для формирования блоков, которые будут обрабатываться только в автореферате, заведена проверка условия `\ifsynopsis`. Значение условия задаётся в основном файле документа (`synopsis.tex` для автореферата).

Целью данной работы является ...

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Исследовать, разработать, вычислить и т. д. и т. п.
2. Исследовать, разработать, вычислить и т. д. и т. п.
3. Исследовать, разработать, вычислить и т. д. и т. п.
4. Исследовать, разработать, вычислить и т. д. и т. п.

Научная новизна:

1. Впервые ...

2. Впервые ...
3. Было выполнено оригинальное исследование ...

Практическая значимость ...

Методология и методы исследования. ...

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Первое положение
2. Второе положение
3. Третье положение
4. Четвертое положение

В папке Documents можно ознакомиться в решении совета из Томского ГУ в файле Def_positions.pdf, где обоснованно даются рекомендации по формулировкам защищаемых положений.

Достоверность полученных результатов обеспечивается ... Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на: перечисление основных конференций, симпозиумов и т. п.

Личный вклад. Автор принимал активное участие ...

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 66 печатных изданиях, 56 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 47 составляют статьи, 17 — в тезисах докладов и трудах конференций.

При использовании пакета biblatex будут подсчитаны все работы, добавленные в файл biblio/author.bib. Для правильного подсчёта работ в различных системах цитирования требуется использовать поля:

- authorvak если публикация индексируется ВАК,
- authorscopus если публикация индексируется Scopus,
- authorwos если публикация индексируется Web of Science,
- authorconf для докладов конференций,
- authorpatent для патентов,
- authorprogram для зарегистрированных программ для ЭВМ,
- authorother для других публикаций.

Для подсчёта используются счётчики:

- citeauthorvak для работ, индексируемых ВАК,
- citeauthorscopus для работ, индексируемых Scopus,
- citeauthorwos для работ, индексируемых Web of Science,
- citeauthorvakscopuswos для работ, индексируемых одной из трёх баз,
- citeauthorscopuswos для работ, индексируемых Scopus или Web of Science,
- citeauthorconf для докладов на конференциях,
- citeauthorother для остальных работ,
- citeauthorpatent для патентов,

- `citeauthorprogram` для зарегистрированных программ для ЭВМ,
- `citeauthor` для суммарного количества работ.

Для добавления в список публикаций автора работ, которые не были процитированы в автореферате, требуется их перечислить с использованием команды `\nocite` в `Synopsis/content.tex`.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения. Первая глава посвящена обзору методов исследований, примененных и разработанных в ходе работы, обсуждается место методов молекулярного и интегративного моделирования в исследовательском процессе. Вторая глава посвящена применению методов суперкомпьютерной молекулярной динамики для изучения динамики нуклеосом. Третья глава посвящена методам вычисления термодинамических параметров гидратации малых молекул на основе их молекулярно-динамических моделей. Четвертая глава посвящена изучению амилоидоподобных фибрилл методами интегративного моделирования. Пятая глава посвящена разработке методов интегративного моделирования комплексов белков с ДНК на основе данных расщепления ДНК гидроксильными радикалами. Шестая глава посвящена построению моделей комплексов нуклеосом с белками хроматина.

Благодарности.

Работы, описанные в диссертации были поддержаны рядом российских и международных грантов и стипендий, в том числе, грантами РФ 18—74—0006, 14-24-00031, 19-74-30003, РФФИ 20-34-70039, 12-04-31942, стипендией сотрудничества России-США в области биомедицинских наук, стипендией Национальной медицинской библиотеки США, Немецким научно-исследовательским обществом, проект SFB 569 A11. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, кластера Biowulf Национальных институтов здоровья (США), кластера Aldan университета г. Ульм (Германия).

Автор выражает благодарности своим научным руководителям и консультантам, под руководством которых автору посчастливилось работать, М.П.Кирпичникову, А.Р.Хохлову, А.Р. Панченко, Д. Ландсману, П.Г. Халатуру, В.А. Иванову, всем соавторам своих научных работ и коллегам за плодотворное сотрудничество, в особенности, В.Б. Журкину, В.М. Студитскому, К.Ву, Х. Жао, А. Гончаренко, Г.А. Армееву, И. Драйзену, Е.-К. Шиллингер, О.С. Соколовой, А.В. Феофанову, Н.В. Малюченко, Е. Бондаренко, М. Валиевой, А. Любительеву и многим другим, коллективам кафедры физики полимеров и кристаллов физического факультета МГУ, кафедры биоинженерии биологического факультета МГУ, Национального Центра Биотехнологической Информации Национальных Институтов Здоровья за продуктивную рабочую атмосферу и обсуждение работы.

Автор выражает благодарность своей семье за поддержку, без которой написание этой работы не было бы возможным, и А.Д. Шайтану за помощь с версткой текста.

Полный объём диссертации составляет XXX страниц с XXX рисунками и XXX таблицами. Список литературы содержит XXX наименований.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость представляемой работы. В последующих главах сначала описывается общий принцип, позволяющий ..., а потом идёт апробация на частных примерах: ... и

Первая глава посвящена ...
картинку можно добавить так:

L^AT_EX

а) L^AT_EX



б) Knuth

Рис. 1 — Подпись к картинке.

Формулы в строку без номера добавляются так:

$$\lambda_{T_s} = K_x \frac{dx}{dT_s}, \quad \lambda_{q_s} = K_x \frac{dx}{dq_s},$$

Вторая глава посвящена исследованию

Третья глава посвящена исследованию

Можно сослаться на свои работы в автореферате. Для этого в файле `Synopsis/setup.tex` необходимо присвоить положительное значение счётчику `\setcounter{usefootcite}{1}`. В таком случае ссылки на работы других авторов будут подстрочными. Изложенные в третьей главе результаты опубликованы в [vakbib1; vakbib2]. Использование подстрочных ссылок внутри таблиц может вызывать проблемы.

В четвертой главе приведено описание
В заключении приведены основные результаты работы, которые за-
ключаются в следующем:

1. На основе анализа ...
2. Численные исследования показали, что ...
3. Математическое моделирование показало ...
4. Для выполнения поставленных задач был создан ...

При использовании пакета `biblatex` список публикаций авто-
ра по теме диссертации формируется в разделе «Публикации» файла
`common/characteristic.tex` при помощи команды `\nocite`

Публикации автора по теме диссертации

- A1. Linking Chromatin Composition and Structural Dynamics at the Nu-
cleosome Level [Текст] / G. A. Armeev [et al.] // Current Opinion in
Structural Biology. — 2019. — June. — Vol. 56. — P. 46–55. — DOI:
[10.1016/j.sbi.2018.11.006](https://doi.org/10.1016/j.sbi.2018.11.006).
- A2. Histone Octamer Structure Is Altered Early in ISW2 ATP-Dependent
Nucleosome Remodeling [Текст] / A. Hada [et al.] // Cell Reports. —
2019. — July 2. — Vol. 28, no. 1. — 282–294.e6. — DOI: [10.1016/j.
celrep.2019.05.106](https://doi.org/10.1016/j.celrep.2019.05.106). — pmid: [31269447](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/31269447/).
- A3. Structural Interpretation of DNA–Protein Hydroxyl-Radical Footprint-
ing Experiments with High Resolution Using HYDROID [Текст] /
A. K. Shaytan [et al.] // Nature Protocols. — 2018. — Nov. — Vol. 13,
no. 11. — P. 2535–2556. — DOI: [10.1038/s41596-018-0048-z](https://doi.org/10.1038/s41596-018-0048-z).
- A4. Hydroxyl-Radical Footprinting Combined with Molecular Modeling
Identifies Unique Features of DNA Conformation and Nucleosome Posi-
tioning [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Nucleic Acids Research. —
2017. — Sept. 19. — Vol. 45, no. 16. — P. 9229–9243. — DOI:
[10.1093/nar/gkx616](https://doi.org/10.1093/nar/gkx616).
- A5. Molecular Basis of CENP-C Association with the CENP-A Nucleosome
at Yeast Centromeres [Текст] / H. Xiao [et al.] // Genes & Develop-
ment. — 2017. — Oct. 1. — Vol. 31, no. 19. — P. 1958–1972. — DOI:
[10.1101/gad.304782.117](https://doi.org/10.1101/gad.304782.117). — pmid: [29074736](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/29074736/).
- A6. HistoneDB 2.0: A Histone Database with Variants—an Integrated Re-
source to Explore Histones and Their Variants [Текст] / E. J. Draizen
[et al.] // Database. — 2016. — Vol. 2016. — baw014. — DOI: [10.1093/
database/baw014](https://doi.org/10.1093/database/baw014).

- A7. MS_HistoneDB, a Manually Curated Resource for Proteomic Analysis of Human and Mouse Histones [Tekcr] / S. El Kennani [et al.] // Epigenetics & Chromatin. — 2017. — Dec. — Vol. 10, no. 1. — DOI: [10.1186/s13072-016-0109-x](https://doi.org/10.1186/s13072-016-0109-x).
- A8. Coupling between Histone Conformations and DNA Geometry in Nucleosomes on a Microsecond Timescale: Atomistic Insights into Nucleosome Functions [Tekcr] / A. K. Shaytan [et al.] // Journal of Molecular Biology. — 2016. — Jan. — Vol. 428, no. 1. — P. 221–237. — DOI: [10.1016/j.jmb.2015.12.004](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2015.12.004).
- A9. Large-Scale ATP-Independent Nucleosome Unfolding by a Histone Chaperone [Tekcr] / M. E. Valieva [et al.] // Nature Structural & Molecular Biology. — 2016. — Dec. — Vol. 23, no. 12. — P. 1111–1116. — DOI: [10.1038/nsmb.3321](https://doi.org/10.1038/nsmb.3321).
- A10. Structural Analysis of Nucleosomal Barrier to Transcription [Tekcr] / D. A. Gaykalova [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2015. — Oct. 27. — Vol. 112, no. 43. — E5787–E5795. — DOI: [10.1073/pnas.1508371112](https://doi.org/10.1073/pnas.1508371112).
- A11. Direct Prediction of Residual Dipolar Couplings of Small Molecules in a Stretched Gel by Stochastic Molecular Dynamics Simulations: Direct Prediction of Residual Dipolar Couplings by Stochastic MD Simulations [Tekcr] / A. O. Frank [et al.] // Magnetic Resonance in Chemistry. — 2015. — Mar. — Vol. 53, no. 3. — P. 213–217. — DOI: [10.1002/mrc.4181](https://doi.org/10.1002/mrc.4181).
- A12. *Nishi, H.* Physicochemical Mechanisms of Protein Regulation by Phosphorylation [Tekcr] / H. Nishi, A. Shaytan, A. R. Panchenko // Frontiers in Genetics. — 2014. — Aug. 7. — Vol. 5. — DOI: [10.3389/fgene.2014.00270](https://doi.org/10.3389/fgene.2014.00270).
- A13. Peptide Nanofibrils Boost Retroviral Gene Transfer and Provide a Rapid Means for Concentrating Viruses [Tekcr] / M. Yolamanova [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2013. — Feb. — Vol. 8, no. 2. — P. 130–136. — DOI: [10.1038/nnano.2012.248](https://doi.org/10.1038/nnano.2012.248).
- A14. Self-Assembling Nanofibers from Thiophene–Peptide Diblock Oligomers: A Combined Experimental and Computer Simulations Study [Tekcr] / A. K. Shaytan [et al.] // ACS Nano. — 2011. — Sept. 27. — Vol. 5, no. 9. — P. 6894–6909. — DOI: [10.1021/nn2011943](https://doi.org/10.1021/nn2011943).
- A15. Self-Organizing Bioinspired Oligothiophene–Oligopeptide Hybrids [Tekcr] / A. K. Shaytan [et al.] // Beilstein Journal of Nanotechnology. — 2011. — Sept. 5. — Vol. 2. — P. 525–544. — DOI: [10.3762/bjnano.2.57](https://doi.org/10.3762/bjnano.2.57).

- A16. *Shaytan, A. K.* Large-Scale Atomistic Simulation of a Nanosized Fibril Formed by Thiophene–Peptide “Molecular Chimeras” [Текст] / A. K. Shaytan, A. R. Khokhlov, P. G. Khalatur // Soft Matter. — 2010. — Vol. 6, no. 7. — P. 1453. — DOI: [10.1039/b918562c](https://doi.org/10.1039/b918562c).
- A17. Free Energy Profiles of Amino Acid Side Chain Analogs near Water-Vapor Interface Obtained via MD Simulations [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Journal of Computational Chemistry. — 2010. — Jan. 15. — Vol. 31, no. 1. — P. 204–216. — DOI: [10.1002/jcc.21267](https://doi.org/10.1002/jcc.21267).
- A18. *Shaytan, A. K.* Solvent Accessible Surface Area of Amino Acid Residues in Globular Proteins: Correlation of Apparent Transfer Free Energies with Experimental Hydrophobicity Scales [Текст] / A. K. Shaytan, K. V. Shaitan, A. R. Khokhlov // Biomacromolecules. — 2009. — May 11. — Vol. 10, no. 5. — P. 1224–1237. — DOI: [10.1021/bm8015169](https://doi.org/10.1021/bm8015169).
- A19. Voltage-Gated Ion Channel Modulation by Lipids: Insights from Molecular Dynamics Simulations [Текст] / M. A. Kasimova [et al.] // Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes. — 2014. — May. — Vol. 1838, no. 5. — P. 1322–1331. — DOI: [10.1016/j.bbamem.2014.01.024](https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2014.01.024).
- A20. Analysis of the Mechanism of Nucleosome Survival during Transcription [Текст] / H.-W. Chang [et al.] // Nucleic Acids Research. — 2014. — Feb. — Vol. 42, no. 3. — P. 1619–1627. — DOI: [10.1093/nar/gkt1120](https://doi.org/10.1093/nar/gkt1120).
- A21. Genome Packaging in EL and Lin68, Two Giant phiKZ-like Bacteriophages of *P. Aeruginosa* [Текст] / O. Sokolova [et al.] // Virology. — 2014. — Nov. — Vol. 468–470. — P. 472–478. — DOI: [10.1016/j.virol.2014.09.002](https://doi.org/10.1016/j.virol.2014.09.002).
- A22. Analyzing Nucleosome Plasticity Using Molecular Dynamics Simulations [Текст] / G. A. Armeev [и др.] // FEBS Open Bio. — 2019. — T. 9, sup1. — C. 19. — DOI: [10.1002/2211-5463.12674](https://doi.org/10.1002/2211-5463.12674).
- A23. *Armeev, G. A.* Conformational Flexibility of Nucleosomes: A Molecular Dynamics Study [Текст] / G. A. Armeev, K. V. Shaitan, A. K. Shaytan // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2015. — July. — Vol. 70, no. 3. — P. 147–151. — DOI: [10.3103/S0096392515030025](https://doi.org/10.3103/S0096392515030025).
- A24. Integrative Modeling of Nucleosomes and Supranucleosomal Structures [Текст] / G. A. Armeev [и др.] // Biophysical Journal. — 2020. — T. 118, № 3. — DOI: [10.1016/j.bpj.2019.11.527](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2019.11.527).
- A25. Modeling of the Structure of Protein–DNA Complexes Using the Data from FRET and Footprinting Experiments [Текст] / G. A. Armeev [et al.] // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2016. — Jan. — Vol. 71, no. 1. — P. 29–33. — DOI: [10.3103/S0096392516010016](https://doi.org/10.3103/S0096392516010016).

- A26. *Armeev, G. A.* Molecular Dynamics Study of the Ionic Environment and Electrical Characteristics of Nucleosomes [Tekcr] / G. A. Armeev, K. V. Shaitan, A. K. Shaytan // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2015. — Oct. — Vol. 70, no. 4. — P. 173–176. — DOI: [10.3103/S0096392515040033](https://doi.org/10.3103/S0096392515040033).
- A27. *Armeev, G. A.* Nucleosome Structure Relaxation during DNA Unwrapping: Molecular Dynamics Simulation Study [Tekcr] / G. A. Armeev, K. V. Shaitan, A. K. Shaytan // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2016. — July. — Vol. 71, no. 3. — P. 141–144. — DOI: [10.3103/S0096392516030020](https://doi.org/10.3103/S0096392516030020).
- A28. *Armeev, G. A.* Python Toolkit for DNA Geometry Analysis and Modeling [Tekcr] / G. A. Armeev, I. Sukhanova, A. K. Shaytan // FEBS Open Bio. — 2019. — T. 9, sup1. — C. 150. — DOI: [10.1002/2211-5463.12675](https://doi.org/10.1002/2211-5463.12675).
- A29. The Effect of Oncomutations and Posttranslational Modifications of Histone H1 on Chromosome Structure and Stability [Tekcr] / M. V. Bass [et al.] // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2019. — July. — Vol. 74, no. 3. — P. 121–126. — DOI: [10.3103/S0096392519030015](https://doi.org/10.3103/S0096392519030015).
- A30. Genomic Profiling of Multiple Sequentially Acquired Tumor Metastatic Sites from an “Exceptional Responder” Lung Adenocarcinoma Patient Reveals Extensive Genomic Heterogeneity and Novel Somatic Variants Driving Treatment Response [Tekcr] / R. Biswas [et al.] // Molecular Case Studies. — 2016. — Nov. — Vol. 2, no. 6. — a001263. — DOI: [10.1101/mcs.a001263](https://doi.org/10.1101/mcs.a001263).
- A31. Comparative Computational Study of Interaction of C60-Fullerene and Tris-Malonyl-C60-Fullerene Isomers with Lipid Bilayer: Relation to Their Antioxidant Effect [Tekcr] / M. E. Bozdaganyan [et al.] // PLoS ONE / ed. by C. M. Soares. — 2014. — July 14. — Vol. 9, no. 7. — e102487. — DOI: [10.1371/journal.pone.0102487](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0102487).
- A32. Pausing as a Mechanism of Nucleosome Recovery [Tekcr] / H.-W. Chang [et al.] // Epigenetics & Chromatin. — 2013. — Mar. — Vol. 6, S1. — DOI: [10.1186/1756-8935-6-S1-P14](https://doi.org/10.1186/1756-8935-6-S1-P14).
- A33. Structural Analysis of the Key Intermediate Formed during Transcription through a Nucleosome [Tekcr] / H.-W. Chang [et al.] // Trends in Cell & Molecular Biology. — 2013. — Vol. 8. — P. 13–23. — pmid: [25364155](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/25364155/).
- A34. Dual Active Site in the Endolytic Transglycosylase Gp144 of Bacteriophage phiKZ [Tekcr] / O. V. Chertkov [et al.] // Acta Naturae. — 2017. — Vol. 9, no. 1. — P. 7.

- A35. Structural Perspectives on the Evolutionary Expansion of Unique Protein-Protein Binding Sites [Текст] / A. Goncarenko [et al.] // Biophysical Journal. — 2015. — Sept. — Vol. 109, no. 6. — P. 1295–1306. — DOI: [10.1016/j.bpj.2015.06.056](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2015.06.056).
- A36. Joint Effect of Histone H1 Amino Acid Sequence and DNA Nucleotide Sequence on the Structure of Chromatosomes: Analysis by Molecular Modeling Methods [Текст] / T. K. Gorkovets [et al.] // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2018. — Apr. — Vol. 73, no. 2. — P. 82–87. — DOI: [10.3103/S0096392518020025](https://doi.org/10.3103/S0096392518020025).
- A37. Mutual Influence of Linker Histone H1 Amino Acid Sequence and DNA Nucleotide Sequence on the Linker Histone H1 Position in Chromatosome [Текст] / T. K. Gorkovets [et al.] // FEBS open bio. — 2018. — Vol. 8, Supplement S1. — P. 346–346. — DOI: [10.1002/2211-5463.12453](https://doi.org/10.1002/2211-5463.12453).
- A38. *Gribkova, A. K.* Construction and Analysis of an Interactome between Nucleosomes and Chromatin Proteins [Текст] / A. K. Gribkova, A. K. Shaytan // FEBS Open Bio. — 2019. — T. 9, sup1. — C. 393. — DOI: [10.1002/2211-5463.12675](https://doi.org/10.1002/2211-5463.12675).
- A39. *Gribkova, A. K.* Investigation of Histone-DNA Binding Energy as a Function of DNA Unwrapping from Nucleosome Using Molecular Modeling [Текст] / A. K. Gribkova, G. A. Armeev, A. K. Shaytan // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2017. — July. — Vol. 72, no. 3. — P. 142–145. — DOI: [10.3103/S009639251703004X](https://doi.org/10.3103/S009639251703004X).
- A40. Investigation of Ion Permeation through the Cx26 Hemichannel [Текст] / M. Kasimova [et al.] // Biophysical Journal. — 2014. — Jan. — Vol. 106, no. 2. — 556a. — DOI: [10.1016/j.bpj.2013.11.3093](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2013.11.3093).
- A41. Molecular Insights into Electroporation and Electrotransfer through Model Cell Membranes [Текст] / M. Kasimova [et al.] // Biophysical Journal. — 2014. — Jan. — Vol. 106, no. 2. — 291a. — DOI: [10.1016/j.bpj.2013.11.1701](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2013.11.1701).
- A42. Molecular Dynamics of Zervamicin II and Its Analogs in Water and Methanol [Текст] / O. V. Levtsova [et al.] // Biophysics. — 2009. — Aug. — Vol. 54, no. 4. — P. 437–441. — DOI: [10.1134/S000635090904006X](https://doi.org/10.1134/S000635090904006X).
- A43. Structure and Functions of Linker Histones [Текст] / A. V. Lyubitelev [et al.] // Biochemistry (Moscow). — 2016. — Mar. — Vol. 81, no. 3. — P. 213–223. — DOI: [10.1134/S0006297916030032](https://doi.org/10.1134/S0006297916030032).
- A44. Динамика Моделей Зервамицинового Канала [Текст] / И. Н. Николаев [и др.] // ВЕСТНИК ЯГУ. — 2010. — Т. 7, № 3. — С. 67–72.

- A45. Взаимодействие Зервамицина ПВ с Липидными Бислоями [Текст] / И. Н. Николаев [и др.] // ВЕСТНИК ЯГУ. — 2010. — Т. 7, № 1. — С. 52—64.
- A46. *Orekhov, P. S.* Calculation of Spectral Shifts of the Mutants of Bacteriorhodopsin by QM/MM Methods [Текст] / P. S. Orekhov, A. K. Shaytan, K. V. Shaitan // Biophysics. — 2012. — Mar. — Vol. 57, no. 2. — P. 144—152. — DOI: [10.1134/S0006350912020170](https://doi.org/10.1134/S0006350912020170).
- A47. *Shaitan, K. V.* The Dynamics of Irreversible Evaporation of a Water-Protein Droplet and the Problem of Structural and Dynamic Experiments with Single Molecules [Текст] / K. V. Shaitan, G. A. Armeev, A. K. Shaytan // Biophysics. — 2016. — Mar. — Vol. 61, no. 2. — P. 177—184. — DOI: [10.1134/S0006350916020172](https://doi.org/10.1134/S0006350916020172).
- A48. Influence of Interionic Interactions on Functional State and Blocker Binding of Voltage-Gated Potassium Channels [Текст] / K. V. Shaitan [et al.] // Moscow University Biological Sciences Bulletin. — 2013. — Mar. — Vol. 68, no. 1. — P. 8—14. — DOI: [10.3103/S0096392513010057](https://doi.org/10.3103/S0096392513010057).
- A49. Combined Influence of Linker DNA and Histone Tails on Nucleosome Dynamics as Revealed by Microsecond Molecular Dynamics Simulations [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. — 2015. — May 18. — Vol. 33, sup1. — P. 3—3. — DOI: [10.1080/07391102.2015.1032630](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1032630).
- A50. Microsecond Molecular Dynamics Simulations of Nucleosomes: Implications for Nucleosome Function [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Biochemistry and Cell Biology. — 2017. — Apr. — Vol. 95. — P. 179—184. — DOI: [10.1139/bcb-2017-0043](https://doi.org/10.1139/bcb-2017-0043).
- A51. Молекулярная Динамика и Дизайн Био- и Наноструктур [Текст] / К. В. Шайтан [и др.] // Вестник биотехнологии. — 2005. — Т. 1, № 1. — С. 66—78.
- A52. Неравновесная Молекулярная Динамика Наноструктур, Включая Биологические [Текст] / К. В. Шайтан [и др.] // Химическая физика. — 2006. — Т. 25, № 9. — С. 31—48.
- A53. *Shaytan, A. K.* Nucleosome Adaptability Conferred by Sequence and Structural Variations in Histone H2A-H2B Dimers [Текст] / A. K. Shaytan, D. Landsman, A. R. Panchenko // Current Opinion in Structural Biology. — 2015. — June. — Vol. 32. — P. 48—57. — DOI: [10.1016/j.sbi.2015.02.004](https://doi.org/10.1016/j.sbi.2015.02.004). — pmid: [25731851](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/25731851/).
- A54. Nucleosome Dynamics at Microsecond Timescale: DNA-Protein Interactions, Water-Mediated Interactions and Nucleosome Formation [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Biophysical Journal. — 2016. — Feb. — Vol. 110, no. 3. — 405a. — DOI: [10.1016/j.bpj.2015.11.2189](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2015.11.2189).

- A55. Polymorphism of Histone Tail Interactions in Nucleosome [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Biophysical Journal. — 2015. — Jan. — Vol. 108, no. 2. — 72a. — DOI: [10.1016/j.bpj.2014.11.431](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2014.11.431).
- A56. Trajectories of Microsecond Molecular Dynamics Simulations of Nucleosomes and Nucleosome Core Particles [Текст] / A. K. Shaytan [et al.] // Data in Brief. — 2016. — June. — Vol. 7. — P. 1678–1681. — DOI: [10.1016/j.dib.2016.04.073](https://doi.org/10.1016/j.dib.2016.04.073).
- A57. *Шайтан, А.К.* Компьютерное Моделирование и Статистический Анализ Самоорганизующихся Молекулярных Систем На Основе Пептидов [Текст] : диссертация на соискание степени кандидата физико-математических наук / Шайтан, А.К. — МГУ имени М.В. Ломоносова, 2010.
- A58. *Shaytan, A. K.* Computer Simulations of Self-Assembling Nanofibers from Thiophene-Peptide Oligomers [Текст] : Dissertation / Shaytan Alexey K. — Universität Ulm, 2012. — DOI: <http://dx.doi.org/10.18725/OPARU-1936>.
- A59. *Armeev, G. A.* Abstract OR-19: Integrative Approach on Nucleosome Complexes Modeling [Текст] / G. A. Armeev, A. R. Panchenko, A. K. Shaytan // International Journal of Biomedicine. — 2019. — Т. 9, s1. — С. 13–14.
- A60. Моделирование Нуклеосом Методами Атомистического Суперкомпьютерного Моделирования [Текст] / Армеев, Г.А. [и др.] // Journal of Qafqaz University - Physics. — 2013. — Т. 1, № 2. — С. 3–11.
- A61. *Bass, M. V.* Abstract P-20: Linker Histone H1: The Interplay between Chromatosome Stability, Oncomutations and Post-Translational Modifications [Текст] / M. V. Bass, G. A. Armeev, A. K. Shaytan // International Journal of Biomedicine. — 2019. — Т. 9, S1. — С. 25.
- A62. *Грешнова, А.А.* Синтетическая Биология: Конструирование Живого [Текст] / Грешнова, А.А., Глухов, Г.С., Шайтан, А.К. // Химия и Жизнь - XXI век. — 2019. — № 9. — С. 32–38.
- A63. Динамический Молекулярный Дизайн Био-и Нано Структур [Текст] / К. Шайтан [и др.] // Российский химический журнал. — 2006. — Т. 1, № 2. — С. 53–65.
- A64. *Shaytan, A. K.* Peptide Dynamics at Water-Membrane Interface [Текст] / A. K. Shaytan, A. R. Khokhlov, V. A. Ivanov // Proceedings of the Fifth International Conference on Bioinformatics of Genome Regulation and Structure. Т. 1. — 2006. — С. 320.

- A65. *Шайтан, А. К.* Суперкомпьютерное конструирование биоорганических нанопроводов [Текст] / А. К. Шайтан, П. Г. Халатур, А. Р. Хохлов // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности / под ред. В. А. Садовничий, В. В. Савин, В. В. Воеводин. — Издательство Московского Университета, 2009. — С. 51—56.
- A66. *Shaytan, A.* Water Mediated Interactions in Nucleosomes [Текст] / A. Shaytan, A. Panchenko // Abstracts of Papers of the American Chemical Society. — 2014. — Aug. 10. — Vol. 248.

Список литературы

1. *Ломоносов, М.* Полное Собрание Сочинений: Ломоносов Михаил Васильевич — Алфавитный Каталог — Электронная Библиотека Руниверс [Текст] / М. Ломоносов. — 1950—1983. — URL: <https://runivers.ru/lib/book6882/> (дата обр. 22.09.2020).
2. GROMACS: High Performance Molecular Simulations through Multi-Level Parallelism from Laptops to Supercomputers [Текст] / M. J. Abraham [и др.] // SoftwareX. — 2015. — 1 сент. — Т. 1/2. — С. 19—25. — DOI: [10.1016/j.softx.2015.06.001](https://doi.org/10.1016/j.softx.2015.06.001).
3. Understanding Amyloid Aggregation by Statistical Analysis of Atomic Force Microscopy Images [Текст] / J. Adamcik [и др.] // Nature Nanotechnology. — 2010. — Т. 5, № 6. — С. 423—428.
4. *Adhikari, B.* Chromosome3D: Reconstructing Three-Dimensional Chromosomal Structures from Hi-C Interaction Frequency Data Using Distance Geometry Simulated Annealing [Текст] / B. Adhikari, T. Trieu, J. Cheng // BMC genomics. — 2016. — Nov. 7. — Vol. 17, no. 1. — P. 886. — DOI: [10.1186/s12864-016-3210-4](https://doi.org/10.1186/s12864-016-3210-4). — pmid: [27821047](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/27821047/).
5. Allosteric Cross-Talk in Chromatin Can Mediate Drug-Drug Synergy [Текст] / Z. Adhiksan [et al.] // Nature Communications. — 2017. — Mar. 30. — Vol. 8, issue 1, no. 1. — P. 14860. — DOI: [10.1038/ncomms14860](https://doi.org/10.1038/ncomms14860).
6. *Adilakshmi, T.* Hydroxyl Radical Footprinting in Vivo: Mapping Macromolecular Structures with Synchrotron Radiation [Текст] / T. Adilakshmi, R. A. Lease, S. A. Woodson // Nucleic Acids Res. — 2006. — Май. — Т. 34, № 8. — e64. — DOI: [10.1093/nar/gkl291](https://doi.org/10.1093/nar/gkl291). — PMID: [16682443](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/16682443/).
7. Nucleosome Dynamics Regulates DNA Processing [Текст] / N. L. Adkins [и др.] // Nature Structural and Molecular Biology. — 2013. — Т. 20, № 7. — С. 836—842. — DOI: [10.1038/nsmb.2585](https://doi.org/10.1038/nsmb.2585).

8. Hierarchical Self-Assembly of Chiral Rod-like Molecules as a Model for Peptide OI-Sheet Tapes, Ribbons, Fibrils, and Fibers [Текст] / A. Aggeli [и др.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2001. — Т. 98, № 21. — С. 11857—11862.
9. *Akcelrud, L.* Electroluminescent Polymers [Текст] / L. Akcelrud // Progress in Polymer Science. — 2003. — Т. 28, № 6. — С. 875—962.
10. *Alder, B.* Molecular Dynamics by Electronic Computers [Текст] / B. Alder, T. Wainwright // Proceedings of the International Symposium on Transport Processes in Statistical Mechanics (Brussels, August 27—31, 1956). — London : Interscience Pub., 1958. — С. 97—131.
11. *Alder, B. J.* Phase Transition for a Hard Sphere System [Текст] / B. J. Alder, T. E. Wainwright // The Journal of Chemical Physics. — 1957. — 1 нояб. — Т. 27, № 5. — С. 1208—1209. — DOI: [10.1063/1.1743957](https://doi.org/10.1063/1.1743957).
12. *Alemdaroglu, F.* DNA Meets Synthetic Polymers — Highly Versatile Hybrid Materials [Текст] / F. Alemdaroglu, A. Herrmann // Organic and Biomolecular Chemistry. — 2007. — Т. 5. — С. 1311—1320.
13. *Allen, M. P.* Computer Simulation of Liquids [Текст] / M. P. Allen, D. J. Tildesley. — New York, NY, USA : Clarendon Press, 1989. — ISBN 0-19-855645-4.
14. *Allen, M.* Computer Simulation of Liquids [Текст] / M. Allen, D. Tildesley. — Oxford University Press, 2002.
15. *Allinger, N. L.* Molecular Mechanics. The MM3 Force Field for Hydrocarbons. [Текст] / N. L. Allinger, Y. H. Yuh, J. H. Lii // Journal of the American Chemical Society. — 1989. — Т. 111, № 23. — С. 8551—8551. — DOI: [10.1021/ja00205a001](https://doi.org/10.1021/ja00205a001).
16. Chromatin Is an Ancient Innovation Conserved between Archaea and Eukarya [Текст] / R. Ammar [и др.] // eLife. — 2012. — Т. 2012, № 1. — С. 1—11. — DOI: [10.7554/eLife.00078](https://doi.org/10.7554/eLife.00078).
17. Nucleosome Breathing and Remodeling Constrain CRISPR-Cas9 Function [Текст] / C. Anders [и др.] // Molecular and Cellular Biology : в APRIL2016. Т. 5. — 2014. — С. 1—20. — ISBN 978-0-12-801185-0. — DOI: [10.1016/B978-0-12-801185-0.00001-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-801185-0.00001-5).
18. *Andersen, H.* Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature [Текст] / H. Andersen // The Journal of Chemical Physics. — 1980. — Т. 72, № 4. — С. 2384—2393.
19. Preferential Interaction of the Core Histone Tail Domains with Linker DNA [Текст] / D. Angelov [и др.] // Proc Natl Acad Sci U S A. — 2001. — 5 июня. — Т. 98, № 12. — С. 6599—604. — DOI: [10.1073/pnas.121171498](https://doi.org/10.1073/pnas.121171498).

20. Polymorphism in Oligothiophenes with an Even Number of Thiophene Subunits [Текст] / L. Antolini [и др.] // Advanced Materials. — 1998. — Т. 10, № 5. — С. 382—385. — DOI: [10.1002/\(sici\)1521-4095\(199803\)10:5<382::aid-adma382>3.3.co;2-p](https://doi.org/10.1002/(sici)1521-4095(199803)10:5<382::aid-adma382>3.3.co;2-p).
21. Secondary Structure of Alpha-Synuclein Oligomers: Characterization by Raman and Atomic Force Microscopy [Текст] / M. M. Apetri [et al.] // Journal of Molecular Biology. — 2006. — Jan. 6. — Vol. 355, no. 1. — P. 63—71. — DOI: [10.1016/j.jmb.2005.10.071](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2005.10.071). — pmid: [16303137](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/16303137/).
22. Cryo-EM Structures of Remodeler-Nucleosome Intermediates Suggest Allosteric Control through the Nucleosome [Текст] / J. P. Armache [et al.] // eLife. — 2019. — June 18. — Vol. 8. — DOI: [10.7554/eLife.46057](https://doi.org/10.7554/eLife.46057). — pmid: [31210637](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/31210637/).
23. Naturally Occurring Fragments from Two Distinct Regions of the Prostatic Acid Phosphatase Form Amyloidogenic Enhancers of HIV Infection [Текст] / F. Arnold [и др.] // Journal of Virology. — 2012. — ЯНВ. — Т. 86, № 2. — С. 1244—1249. — DOI: [10.1128/JVI.06121-11](https://doi.org/10.1128/JVI.06121-11). — pmid: [22090109](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/22090109/).
24. Ordered Stacking of Regioregular Head-to-Tail Polyalkylthiophenes: Insights from the Crystal Structure of Form I_B TI Poly(3-n-Butylthiophene) [Текст] / P. Arosio [и др.] // Chemistry of Materials. — 2009. — Т. 21, № 1. — С. 78—87.
25. *Arya, G.* Role of Histone Tails in Chromatin Folding Revealed by a Mesoscopic Oligonucleosome Model [Текст] / G. Arya, T. Schlick // Proc Natl Acad Sci U S A. — 2006. — 31 окт. — Т. 103, № 44. — С. 16236—41. — DOI: [10.1073/pnas.0604817103](https://doi.org/10.1073/pnas.0604817103).
26. *Atkins, P.* Atkins' Physical Chemistry [Текст] / P. Atkins, J. de Paula. — Oxford University Press, 2006.
27. *Aucagne, V.* Chemoselective Formation of Successive Triazole Linkages in One Pot: "Click-Click" Chemistry [Текст] / V. Aucagne, D. A. Leigh // Org. Lett. — 2006. — Т. 8, № 20. — С. 4505—4507.
28. *author, U.* English: ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) in Philadelphia, Pennsylvania. Glen Beck (Background) and Betty Snyder (Foreground) Program the ENIAC in Building 328 at the Ballistic Research Laboratory (BRL). [Текст] / U. author. — circa 1947 date QS:P,+1947-00-00T00:00:00Z/9,P1480,Q5727902 to 1955.
29. Coincidence of the Molecular Organization of B-Substituted Oligothiophenes in Two-Dimensional Layers and Three-Dimensional Crystals [Текст] / R. Azumi [и др.] // Chem. Eur. J. — 2000. — Т. 6, № 4. — С. 735—744.

30. *Babcock, M. S.* Nucleic Acid Structure Analysis. Mathematics for Local Cartesian and Helical Structure Parameters That Are Truly Comparable between Structures [Текст] / M. S. Babcock, E. P. Pednault, W. K. Olson // Journal of Molecular Biology. — 1994. — Mar. 18. — Vol. 237, no. 1. — P. 125–156. — DOI: [10.1006/jmbi.1994.1213](https://doi.org/10.1006/jmbi.1994.1213). — pmid: [8133513](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/8133513/).
31. *Baek, M.-G.* Design and Synthesis of Novel Glycopolythiophene Assemblies for Colorimetric Detection of Influenza Virus and E. Coli [Текст] / M.-G. Baek, R. Stevens, D. Charych // Bioconjugate Chemistry. — 2000. — Т. 11, № 6. — С. 777–788.
32. *Baker, R. E.* Genetic and Genomic Analysis of the AT-Rich Centromere DNA Element II of *Saccharomyces Cerevisiae* [Текст] / R. E. Baker, K. Rogers // Genetics. — 2005. — Dec. — Vol. 171, no. 4. — P. 1463–75. — DOI: [10.1534/genetics.105.046458](https://doi.org/10.1534/genetics.105.046458).
33. *Balasubramanian, B.* DNA Strand Breaking by the Hydroxyl Radical Is Governed by the Accessible Surface Areas of the Hydrogen Atoms of the DNA Backbone [Текст] / B. Balasubramanian, W. K. Pogozelski, T. D. Tullius // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 1998. — Aug. 18. — Vol. 95, no. 17. — P. 9738–9743. — DOI: [10.1073/pnas.95.17.9738](https://doi.org/10.1073/pnas.95.17.9738). — pmid: [9707545](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/9707545/).
34. Supramolecular Structure in Full-Length Alzheimer’s Beta-Amyloid Fibrils: Evidence for a Parallel Beta-Sheet Organization from Solid-State Nuclear Magnetic Resonance [Текст] / J. Balbach [и др.] // Biophys. J. — 2002. — Т. 83, № 2. — С. 1205–1216.
35. Cytochrome Display on Amyloid Fibrils [Текст] / A. J. Baldwin [et al.] // Journal of the American Chemical Society. — 2006. — Feb. 22. — Vol. 128, no. 7. — P. 2162–2163. — DOI: [10.1021/ja0565673](https://doi.org/10.1021/ja0565673). — pmid: [16478140](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/16478140/).
36. *Balzani, V.* Electron Transfer in Chemistry [Текст] / V. Balzani. — Weinheim/New York : WILEY-VCH Verlag GmbH, 2001.
37. Structural Plasticity of Single Chromatin Fibers Revealed by Torsional Manipulation [Текст] / A. Bancaud [и др.] // Nature Structural and Molecular Biology. — 2006. — Т. 13, № 5. — С. 444–450. — DOI: [10.1038/nsmb1087](https://doi.org/10.1038/nsmb1087).
38. *Bao, Y.* Nucleosome Core Particles Containing a Poly(dA.dT) Sequence Element Exhibit a Locally Distorted DNA Structure [Текст] / Y. Bao, C. L. White, K. Luger // J Mol Biol. — 2006. — Aug. 25. — Vol. 361, no. 4. — P. 617–24. — DOI: [10.1016/j.jmb.2006.06.051](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2006.06.051).
39. Structure of DNA in a Nucleosome Core at High Salt Concentration and at High Temperature [Текст] / J. Bashkin [et al.] // Biochemistry. — 1993. — Mar. 2. — Vol. 32, no. 8. — P. 1895–8.

40. *Bäuerle, P.* Specific Recognition of Nucleobase-Functionalized Polythiophenes [Текст] / P. Bäuerle, A. Emge // Advanced Materials. — 1998. — Т. 10, № 4. — С. 324—330.
41. *Aleshin, A.* One-Dimensional Charge Transport in Conducting Polymer Nanofibers [Текст] / A. Aleshin, Y. Park // Handbook of Conducting Polymers, Conjugated Polymers: Theory, Synthesis, Properties, and Characterization / под ред. Т. А. Skotheim, J. R. Reynolds. — CRC Press, Taylor & Francis Group, 2007.

Шайтан Алексей Константинович

Интегративное моделирование структуры и динамики биомакромолекулярных
комплексов

Автореф. дис. на соискание ученой степени докт. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____._____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____

