

ПРОТОКОЛ № 7

ЗАСЕДАНИЯ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.172.01 (Д 001.010.01) при **Федеральном государственном бюджетном научном учреждении** **«Научно-исследовательский институт биомедицинской химии** **имени В.Н. Ореховича»**

от 06 июля 2023 г.

ПРИСУТСТВОВАЛИ ЧЛЕНЫ СОВЕТА: А.И. Арчаков (Председатель совета), А.Е. Медведев (зам. Председателя совета), В.В. Поройков (зам. Председателя совета), Е.А. Карпова (Ученый секретарь совета), А.В. Веселовский, Д.Д. Жданов, В.Г. Згода, А.С. Иванов, Ю.Д. Иванов, Е.Н. Ильина, Е.Ф. Колесанова, А.А. Лагунин, А.В. Лисица, П.Г. Лохов, Т.О. Плешакова, Е.А. Пономаренко, Е.В. Супрун, В.В. Шумянцева, К.Н. Ярыгин

Повестка заседания

1. Принятие к защите поступившей в совет диссертации (аспиранта), младшего научного сотрудника лаборатории структурной биоинформатики отдела биоинформатики Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича» Щербакова Кирилла Андреевича на тему: «Исследование антиандрогенной активности стероидных гибридов методами молекулярного моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. - «Математическая биология, биоинформатика». Научный руководитель – доктор биологических наук Веселовский Александр Владимирович.

СЛУШАЛИ:

Итоги работы комиссии диссертационного совета в составе: д.б.н. Пономаренко Е.А., д.б.н., профессора Иванова Ю.Д., д.б.н., профессора Медведева А.Е. по предварительному рассмотрению диссертационной работы Щербакова Кирилла Андреевича на тему: «Исследование антиандрогенной активности стероидных гибридов методами молекулярного моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. - «Математическая биология, биоинформатика».

(Председатель комиссии д.б.н. Пономаренко Е.А. зачитывает заключение экспертной комиссии).

ПОСТАНОВИЛИ:

На основании заключения комиссии диссертационного совета и единогласного открытого голосования принять к защите диссертационную работу Щербакова Кирилла Андреевича на тему: «Исследование антиандрогенной активности стероидных гибридов методами молекулярного моделирования», которая посвящена решению задач, представляющих научный и практический интерес, в частности исследованию механизмов взаимодействия стероидных соединений с

молекулярными мишенями для терапии рака предстательной железы.

Среди наиболее значимых результатов исследования Щербакова К.А. следует отметить исследованный методами докинга и молекулярной динамики механизм взаимодействия новых стероидных соединений с лиганд-связывающим доменом андрогенового дикого типа и его известных мутантов, устойчивых к антагонистам, а также построенные модели комплексов стероид-метаболизирующих цитохромов Р450 с рядом антиандрогенных стероидных гибридов.

Выявление механизмов взаимодействия абиратерона, галетерона и их метаболитов со стероид-метаболизирующими цитохромами Р450 позволяет спрогнозировать изменения в метаболизме стероидных гормонов, которые следует учитывать при разработке более эффективных препаратов для лечения рака простаты.

По актуальности, новизне полученных результатов, объему, уровню выполнения диссертационная работа Щербакова Кирилла Андреевича «Исследование антиандрогенной активности стероидных гибридов методами молекулярного моделирования» соответствует критериям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (ред. от 01.10.2018 г. №1168 с изменениями от 20.03.2021 № 426 и от 26 сентября 2022 г. № 1690).

НАЗНАЧИТЬ:

официальными оппонентами:

1. Васильева Павла Михайловича, доктора биологических наук, профессора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный медицинский университет» Минздрава РФ, Научный центр инновационных лекарственных средств (НЦИЛС), заведующий лабораторией;
2. Чугунова Антона Олеговича, кандидата физико-математических наук Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук, лаборатория моделирования биомолекулярных систем, старший научный сотрудник;

ведущей организацией:

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины имени академика Ю.М. Лопухина Федерального медико-биологического агентства»;

предполагаемая дата защиты – 05 октября 2023 г;

разрешить печатание на правах рукописи автореферата;

утвердить список рассылки автореферата.

2. Принятие к защите поступившей в совет диссертации (аспиранта) младшего научного сотрудника лаборатории структурно-функционального конструирования

лекарств отдела биоинформатики Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича» Карасева Дмитрия Алексеевича на тему: «Разработка метода протеохеометрики для предсказания взаимодействий белков и лигандов на основе их локального сходства», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. - «Математическая биология, биоинформатика». Научный руководитель – доктор биологических наук, профессор РАН Лагунин Алексей Александрович.

СЛУШАЛИ:

Итоги работы комиссии диссертационного совета в составе: д.б.н. Пономаренко Е.А., д.б.н., профессора Иванова Ю.Д., д.б.н., профессора Медведева А.Е. по предварительному рассмотрению диссертационной работы Карасева Дмитрия Алексеевича на тему: «Разработка метода протеохеометрики для предсказания взаимодействий белков и лигандов на основе их локального сходства», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. - «Математическая биология, биоинформатика».

(Председатель комиссии д.б.н. Пономаренко Е.А. зачитывает заключение экспертной комиссии).

ПОСТАНОВИЛИ:

На основании заключения комиссии диссертационного совета и единогласного открытого голосования принять к защите диссертационную работу Карасева Дмитрия Алексеевича на тему: «Разработка метода протеохеометрики для предсказания взаимодействий белков и лигандов на основе их локального сходства», которая посвящена решению задач, представляющих научный и практический интерес. Диссертант разработал оригинальный метод протеохеометрики, при помощи которого можно прогнозировать белок-лигандные взаимодействия для различных групп белков-мишеней, и продемонстрировал его эффективность при прогнозировании спектра лигандов на основе аминокислотной последовательности белка-мишени.

Практическая ценность работы заключается в том, что используя разработанный метод протеохеометрики, предложенный для предсказания взаимодействий белков лигандов на основе их локального сходства, можно отбирать наиболее перспективные соединения для прямого экспериментального тестирования как в отношении уже известных фармакологических мишеней, так и новых белковых мишеней, для которых низкомолекулярные лиганды неизвестны.

По актуальности, новизне полученных результатов, объему, уровню выполнения диссертационная работа Карасева Дмитрия Алексеевича «Разработка метода протеохеометрики для предсказания взаимодействий белков и лигандов на основе их локального сходства» соответствует критериям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (ред. от 01.10.2018 г. №1168 с

изменениями от 20.03.2021 № 426 и от 26 сентября 2022 г. № 1690).

НАЗНАЧИТЬ:

официальными оппонентами:

1. Карягину-Жулину Анну Станиславовну, доктора биологических наук, профессора, главного научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии имени почетного академика Н.Ф. Гамалеи» Министерства здравоохранения Российской Федерации;
2. Орлова Юрия Львовича, доктора биологических наук, профессора РАН, профессора Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет);

ведущей организацией:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук;

предполагаемая дата защиты – 26 октября 2023 г;

разрешить печатание на правах рукописи автореферата;

утвердить список рассылки автореферата.

3. Принятие к защите поступившей в совет диссертации младшего научного сотрудника лаборатории структурно-функционального конструирования лекарств отдела биоинформатики Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича» Столбова Леонида Алексеевича на тему: «Разработка подходов к виртуальному скринингу антивирусных соединений с учетом гетерогенности информации», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. - «Математическая биология, биоинформатика». Научный руководитель – доктор биологических наук, профессор, член-корреспондент РАН Поройков Владимир Васильевич, научный консультант - кандидат физико-математических наук Филимонов Дмитрий Алексеевич.

СЛУШАЛИ:

Итоги работы комиссии диссертационного совета в составе д.б.н. Пономаренко Е.А., д.б.н., профессора Иванова Ю.Д., д.б.н., профессора Медведева А.Е. по предварительному рассмотрению диссертационной работы Столбова Леонида Алексеевича на тему: «Разработка подходов к виртуальному скринингу антивирусных соединений с учетом гетерогенности информации», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8.

- «Математическая биология, биоинформатика».

(Председатель комиссии д.б.н. Пономаренко Е.А. зачитывает заключение экспертной комиссии).

ПОСТАНОВИЛИ:

На основании заключения комиссии диссертационного совета и единогласного открытого голосования принять к защите диссертационную работу Столбова Леонида Алексеевича на тему: «Разработка подходов к виртуальному скринингу антивирусных соединений с учетом гетерогенности информации», которая посвящена решению задач, представляющих научный и практический интерес. В ходе работы диссертантом предложены и реализованы алгоритмы самосогласованной логистической и экстремальной классификации (SCLC и SCEC), которые не уступают по точности альтернативным подходам, но позволяют создавать модели зависимости «структура-активность» с более высокой прогностической способностью при меньшем числе независимых переменных. Построенные количественные и классификационные модели зависимостей «структура-активность» для ингибиторов белков ВИЧ-1 обладают преимуществами над существующими при использовании гетерогенных данных. Разработанные классификационные модели для ингибиторов ферментов SARS-CoV-2 обладают удовлетворительной точностью и предсказательной способностью.

Разработанные в диссертационной работе методы анализа взаимосвязей «структура-активность» могут быть применены для поиска и конструирования новых антивирусных соединений – прототипов лекарств для терапии ВИЧ-инфекции и COVID-19.

По актуальности, новизне полученных результатов, объему, уровню выполнения диссертационная работа Столбова Леонида Алексеевича по теме диссертации «Разработка подходов к виртуальному скринингу антивирусных соединений с учетом гетерогенности информации» соответствует критериям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (ред. от 01.10.2018 г. №1168 с изменениями от 20.03.2021 № 426 и от 26 сентября 2022 г. № 1690).

НАЗНАЧИТЬ:

официальными оппонентами:

1. Васильева Павла Михайловича, доктора биологических наук, профессора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный медицинский университет» Минздрава РФ, Научный центр инновационных лекарственных средств (НЦИЛС), заведующий лабораторией;
2. Порозова Юрия Борисовича, кандидата медицинских наук, доцента, руководителя Центра био- и хемоинформатики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова Министерства

здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет);

ведущей организацией - Федеральное государственное автономное научное учреждение «Федеральный научный центр исследований и разработки иммунобиологических препаратов им. М.П. Чумакова РАН» (Институт полиомиелита) (ФГБНУ «ФНЦИРИП им. М. П. Чумакова РАН»);

предполагаемая дата защиты – 26 октября 2023 г;
разрешить печатание на правах рукописи автореферата;
утвердить список рассылки автореферата.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ
ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА
ДОКТ. БИОЛ. НАУК, АКАДЕМИК

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА
КАНД. ХИМ. НАУК



А.И. АРЧАКОВ

Е.А. КАРПОВА