

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ПДС 0300.025

ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ
НАРОДОВ ИМЕНИ ПАТРИСА ЛУМУМБЫ» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

Аттестационное дело № _____

Решение диссертационного совета от 3 июля 2026 г., протокол № 7

О присуждении Неруху Дмитрию Александровичу, гражданину Великобритании, ученой степени доктора биологических наук.

Диссертация на тему **«Сложная динамика больших биомолекулярных систем в водных растворах»** по специальностям 1.5.4. Биохимия и 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика в виде рукописи принята к защите 27 апреля 2026 г., протокол № 6, диссертационным советом ПДС 0300.025 Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» (РУДН) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, дом 6; приказ от 27 января 2025 года № 26).

Соискатель Нерух Дмитрий Александрович, 1969 года рождения, гражданин Великобритании, в 1993 году окончил Харьковский государственный университет по специальности «Химия».

С 01.10.1993 по 01.09.1996 года Нерух Д.А. учился в аспирантуре Харьковского государственного университета и был прикреплен для выполнения диссертационной работы на кафедру неорганической химии химического факультета.

За время обучения в аспирантуре он подготовил кандидатскую диссертацию по теме «Межчастичные взаимодействия и динамика молекул в электролитных растворах n-гексанола и ацетонитрила по данным колебательной спектроскопии» по специальности 02.00.04 Физическая химия, которую успешно защитил в 1996 году на заседании диссертационного совета Д 02.02.14 Харьковского государственного университета (диплом кандидата наук КН № 012940 выдан 01.11.1996 г.).

С 10.1996 г. по 08.1997 г. он работал инженером на кафедре органической химии Харьковского государственного университета.

С 09.1997 г. по 09.2013 года Нерух Д.А. работал в научных командировках Великобритании (г. Лидс, Бирмингем, Кембридж), США (г. Рено), Япония (г. Кобе).

С 2019 г по 2022 гг. в период подготовки диссертационной работы на соискание ученой степени доктора наук он был стажером научно-исследовательского Центра физики конденсированного состояния Курского государственного университета по программе научно-инновационной кадровой мобильности им. Марии Склодовской-Кюри в рамках программы Horizon 2020 и договора между Астонским университетом и Курским государственным университетом (№228 от 01.04.2019 г.).

Для прохождения научной стажировки и завершения работы над докторской диссертацией Нерух Д.А. был прикреплен к научно-исследовательскому центру физики конденсированного состояния Курского государственного университета (протокол №40 от 10.06.2025).

С 01.01.2010 года по настоящее время он является старшим лектором кафедры прикладной

математики и науки Астонского университета (г. Бирмингем, Великобритания).

Тема диссертационного исследования была утверждена на заседании научно-технического совета Курского государственного университета (протокол №40 от 10.06.2025).

Официальные оппоненты:

- **Соколов Алексей Викторович**, доктор биологических наук, профессор РАН, заведующий лабораторией анализа межмолекулярных взаимодействий отдела молекулярной биологии, генетики и фундаментальной медицины Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Институт экспериментальной медицины»;
- **Лисица Андрей Валерьевич**, доктор биологических наук, академик РАН (Отделение медицинских наук РАН), заведующий лаборатории биохимии и химической патологии белков Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»;
- **Чуев Геннадий Николаевич**, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт теоретической и экспериментальной биофизики» РАН;
- **Павлов Александр Александрович**, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник, руководитель Центра цифрового материаловедения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова» РАН

дали положительные отзывы о диссертации.

Соискатель имеет 59 печатных статей, 54 из которых изданы в журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ (563 стр.) и 10 тезисах докладов на международных научных конференциях и форумах. Общий объем публикаций составляет 34,2 п.л. Авторский вклад – 85%.

Наиболее значимые публикации:

1. Abdjan M. I., Shafiq M., Nerukh D., Nur-e-Alam M., Ul-Haq Z. Exploring the mechanism of action of spirooxindoles as a class of CDK2 inhibitors: a structure-based computational approach. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2024, 26, 16139-16152 doi: 10.1039/D4CP00844H
2. Tariq S.S., Zia K., Nur e Alam M., Nerukh D., Farafonov V.S., Ul-Haq Z. Impact of mutations in SARS-CoV-2 recombinant sub-variant XBB.1.16 on the binding affinity with Human ACE2 receptor. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 2024, 131: 108813 doi: 10.1016/j.jmglm.2024.108813
3. Karabasov S.A., Zaitsev M.A., Nerukh D.A. The nut-and-bolt motion of a bacteriophage sliding along a bacterial flagellum: a complete hydrodynamics model. *Scientific Reports*, 2023, 13(1):9077 doi: 10.1038/s41598-023-36186-1
4. Farafonov V.S., Stich M., Nerukh D. Reconstruction and validation of entire virus model with complete genome from mixed resolution cryo-EM density. *Faraday Discuss.*, 2022, 240, 152-167 doi: 10.1039/D2FD00053A
5. Tarasova E., Okimoto N., Feng S., Nerukh D., Khayat R., Taiji M. Constant pH molecular dynamics of porcine circovirus 2 capsid protein reveals a mechanism for capsid assembly. *Physical*

Chemistry Chemical Physics, 2021, 23(43): 24617-24626 doi: 10.1039/d1cp02874j

6. Qaiser H., Saeed M., Nerukh D. et al. Structural insight into TNF- α inhibitors through combining pharmacophore-based virtual screening and molecular dynamic simulation. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 2020, 39 (16), 5920–5939. doi: 10.1080/07391102.2020.1796794

7. Farafonov V. S., Nerukh D. MS2 bacteriophage capsid studied using all-atom molecular dynamics. *Interface Focus*, 2019, 9(3):20180081 doi: 10.1098/rsfs.2018.0081

8. Tarasova E., Farafonov V., Taiji M., Nerukh D. Details of charge distribution in stable viral capsid. *Journal of Molecular Liquids*, 2018, 265, 585-591

9. Tarasova E., Farafonov V., Khayat R., Okimoto N., Komatsu Teruhisa S., Taiji M., Nerukh D. All-Atom Molecular Dynamics Simulations of Entire Virus Capsid Reveal the Role of Ion Distribution in Capsid's Stability. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2017, 8(4): 779-784 doi: 10.1021/acs.jpcclett.6b02759

10. Nerukh D., Karabasov S. Water-Peptide Dynamics during Conformational Transitions. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2013, 4 (5), 815–819. doi: 10.1021/jz400051p

11. Nerukh D., Okimoto N., Suenaga A. et al. Ligand Diffusion on Protein Surface Observed in Molecular Dynamics Simulation. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2012, 3 (23), 3476–3479. doi: 10.1021/jz301635h

На автореферат диссертации поступили **9** положительных, не содержащих критических замечаний отзывов:

1) **Замятнин Андрей Александрович**, доктор биологических наук, профессор, и.о. декана факультета биоинженерии и биоинформатики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова».

Отзыв положительный. При общей высокой оценке работы возникли вопросы и замечания дискуссионного характера, которые не затрагивают основных достоинств работы и не снижают общую положительную оценку выполненной работы:

1. В автореферате при описании процессов ассоциации малых молекул с каталазой и альбумином следовало бы подробнее охарактеризовать геометрию и стерические особенности переходного состояния лиганда непосредственно в момент его вхождения в глубокие гидрофобные карманы белков.
2. Желательно было бы расширить обсуждение степени влияния выбора силового поля (force field) атомистической части модели на точность сопряжения локальных флуктуаций белковой глобулы с макроскопическими параметрами гидродинамического термостата.

2) **Осипов Анатолий Николаевич**, доктор биологических наук, профессор, член-корреспондент РАН, заведующий отделом медицинской биофизики, профессор кафедры общей и медицинской биофизики МБФ ФГАОУ ВО «Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И. Пирогова» МЗ РФ.

Отзыв положительный, указанные замечания носят характер пожеланий, не снижают высокое научно-теоретическое и практическое значение полученных результатов и не влияют на общую положительную оценку работы.

1. В тексте автореферата при описании сопряжения атомистической и гидродинамической

областей следовало бы привести более подробные иллюстративные схемы распределения плотности и скорости на границе раздела фаз.

2. Описание реализации алгоритмов параллельных вычислений в коде пакета GROMACS выиграло бы от более детального представления графиков масштабируемости разработанных модулей на суперкомпьютерах Fugaki и Cirrus при максимальном числе задействованных вычислительных ядер.

3) **Сенатов Фёдор Святославович**, доктор физико-математических наук, директор Института биомедицинской инженерии ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС».

Отзыв положительный, замечаний нет.

4) **Насыбуллов Тимур Ринатович**, доктор физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник Института математики им. С.Л. Соболева, заместитель директора Международного научно-образовательного математического центра, заместитель декана по развитию Механико-математического факультета Новосибирского государственного университета.

Отзыв положительный, по оформлению и содержанию автореферата замечаний нет.

5) **Панасенко Олег Михайлович**, доктор биологических наук, член-корреспондент РАН, заведующий отделом биофизики и лабораторией физико-химических методов исследования и анализа ФГБУ «Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины имени академика Ю.М. Лопухина Федерального медико-биологического агентства».

Отзыв положительный, указанные замечания имеют характер конструктивного уточнения, не снижают научную ценность результатов и не влияют на общую исключительно высокую оценку диссертации:

1. В автореферате при описании моделей капсидов вирусов PCV2 и MS2 следовало бы подробнее осветить вопрос о том, как гибридный метод учитывает флуктуации объема внутренней полости капсида при наличии или отсутствии внутри нее вирусного генома (РНК/ДНК).
2. Автору следовало бы привести конкретные данные по выигрышу в процессорном времени при использовании разработанной гидродинамической схемы растворителя по сравнению со стандартным полноатомным моделированием вирусных капсидов в аналогичном объеме моделируемой ячейки.

6) **Каравасев Анатолий Сергеевич**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой динамического моделирования и биомедицинской инженерии Федеративного государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского».

Отзыв положительный, дана высокая оценка работы, замечаний нет.

7) **Зюбин Андрей Юрьевич**, доктор физико-математических наук (специальность 1.5.2. Биофизика), доцент, старший научный сотрудник НО Центра «Фундаментальная и прикладная фотоника. Нанопотоника» ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта».

Отзыв положительный, замечания отсутствуют.

8) **Алиев Рубин Рекатович**, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки, Института теоретической и экспериментальной биофизики РАН (ИТЭБ РАН).

Отзыв на автореферат положительный, указанные вопросы и замечания возникли из научного интереса к представленной работе, носят уточняющий характер, не снижают очевидную научную и практическую ценность полученных результатов, не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы.

1. На мой взгляд, в работе недостаточно подробно обсуждены эффекты электрических полей, присутствующих из-за наличия свободных ионов в растворах электролитов, физиологических жидкостях, а также полей фиксированных зарядов в белках и других макромолекулах живых систем. В частности, вопрос: как сказывается известный эффект «структурированной воды» в физиологическом растворе, за счёт образования «шубы» из молекул воды вокруг свободных ионов? В физиологическом растворе концентрация ионов натрия около 150 мМ/л.
2. Насколько возможно включение электрических полей, то есть, дальнодействующих полей, при расширении предложенной гидродинамической модели, построенной, по сути, на подсчёте обмена веществом и импульсом между соседними микрообъёмами?
3. При определении стохастических членов используется флуктуационно-диссипативная теорема. Вопрос: насколько эта теорема применима к существенно неоднородной среде, составляющей внутри- и внеклеточную жидкость для живых систем?

9) **Карабасов Сергей Александрович**, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник НИО-9, ФАУ «Центральный аэродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского».

Отзыв на автореферат положительный, указанные два замечания не носят принципиального характера:

1. При изложении положений, выносимых на защиту, следовало бы более чётко разграничить методологические результаты, относящиеся к разработке самой модели, где её точность верифицируется на соответствующих эталонных решениях и собственно валидацию – прикладные результаты, полученные при изучении конкретных вирусных систем, результаты которых сравниваются с результатами эксперимента, которые также содержат некоторую неопределённость.
2. Как упомянуто в диссертации, главной мотивацией использования гибридного подхода моделирования, где полноатомные расчёты молекулярных систем сопрягаются с гидродинамическим моделированием окружающей воды, является преодоление проблемы микроскопически малого шага интегрирования по времени, свойственного классическим молекулярно-динамическим расчётам. Из автореферата понятно, что с помощью гидродинамического описания можно уменьшить количество атомов окружающей воды в расчёте, т. е. уменьшив размер вычислительной модели по пространству, но как быть с шагом по времени, который всё равно остается микроскопически малым из-за необходимости разрешения межатомных взаимодействий на масштабах бимолекулярной системы? Было бы полезно привести количественные показатели ускорения расчетов гибридного

метода в сравнении со стандартной полноатомной молекулярной динамикой для какой-либо из рассмотренных систем.

В отзывах на автореферат указывается, что диссертационная работа является актуальной, результаты исследований имеют фундаментальное значение и практическую значимость для биохимии, математической биологии и биоинформатики. Актуальность диссертационного исследования обусловлена высокой научной значимостью, на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области моделирования свойств сложных биомолекулярных систем на различных уровнях их биологической организации, физико-химических и биохимических масштабах процессов и структур. Особое биохимическое значение работы состоит в новых подходах к моделированию взаимодействия белков между собой, в том числе вирусных капсидных белков, а также белков с низкомолекулярными лигандами в водных растворах. Работа базируется на современных методах исследования, теоретические данные подтверждены экспериментально. Выводы и положения, выносимые на защиту, логически вытекают из представленных результатов, достоверны и не вызывают сомнений. Подчеркивается, что дизайн и методы исследования являются современными, оригинальными, соответствуют цели и задачам исследования, а диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым на соискание ученой степени доктора биологических наук по специальностям 1.5.4. Биохимия и 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

Обоснование выбора официальных оппонентов диссертационным советом:

Выбор официальных оппонентов обоснован их высокой квалификацией, наличием научных трудов и публикаций, соответствующих теме оппонируемой диссертационной работы.

- **Соколов Алексей Викторович**, доктор биологических наук, профессор РАН, является одним из ведущих специалистов в области биохимии и молекулярного моделирования. Область его интересов посвящена изучению роли взаимодействия металлопротеинов и других белков острой фазы воспаления в регуляции воспалительных процессов; поиску диагностических маркеров и предикторов развития сердечно-сосудистых, нейродегенеративных и других заболеваний; а также усовершенствованию методов и технологий получения белков и антител, биофизических и биохимических методов для клинко-лабораторной диагностики. Он участвовал в 35 грантовых исследованиях, поддержанных фондами РФФИ, РНФ и Советом при Президенте России, в 6 грантах был руководителем. За цикл работ на тему «Роль белков острой фазы воспаления в ряде патологических процессов» в составе коллектива авторов он был удостоен премии имени принца А.П. Ольденбургского. Исследование молекулярных механизмов взаимодействия между белками является одной из задач настоящей работы.

Основные публикации оппонента по тематике диссертационного исследования:

1. Gorudko I.V., Grigorieva D.V., Reut V.E., Martinovich G.G., Sokolov A.V., Panasenko O.M. Myeloperoxidase as a regulator of cell signaling under oxidative/halogenative stress. *Biochemistry (Moscow)*. 2026, 91, № S1, S51-S83. doi: 10.1134/S0006297925603788

2. Zelenskyi E.A., Rutto K.V., Trulioff A.S., Gorbunov N.P., Sokolov A.V., Kisseleva E.P. Metabolic disorders in mice bearing transplantable hepatoma 22A: a focus on ceruloplasmin. *Journal of Evolutionary Biochemistry and Physiology*. 2025, 61, № 3, 899-912. doi: 10.1134/S0022093025030172
3. Yudenko A., Bukhdruker S., Shishkin P., Rodin S., Burtseva A., Petrov A., Pigareva N., Sokolov A., et al. Structural basis of signaling complex inhibition by IL-6 domain-swapped dimers. *Structure*. 2025, 33, № 1, 171-180.e5. doi: 10.1016/j.str.2024.10.028
4. Elizarova A.Yu., Sokolov A.V., Kostevich V.A., Gorbunov N.P., et al. Recombinant human holo-lactoferrin in complex with oleic acid suppresses the growth of solid myeloma more efficiently than its apo-form. *Biochemistry and Cell Biology*. 2025, 103, 159. doi: 10.1139/bcb-2024-0159
5. Grigorieva D.V., Gorbunov N.P., Kostevich V.A., Sokolov A.V., et al. Human serum albumin modified in myeloperoxidase-dependent reactions is a mediator of neutrophil extracellular trap formation. *J. Biomedical Research*. 2025, 39, № 5, 69. doi: 10.7555/JBR.39.20250069
6. Mosievich D.V., Balabushevich N.G., Mishin P.I., Filatova L.Y., Murina M.A., Pobeguts O.V., Galyamina M.A., Obraztsova E.A., Grigorieva D.V., Gorudko I.V., Sokolov A.V., et al. Vaterite/fucoidan hybrid microparticles: fabrication, loading of lactoferrin, structural characteristics and functional properties. *Marine Drugs*. 2025, 23, № 11, 428. doi: 10.3390/md23110428.

- **Лисица Андрей Валерьевич**, доктор биологических наук, академик РАН, является одним из ведущих специалистов в области биохимии, биоинформатики и генетических технологий. Под его руководством в 2020 году на базе Института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича был создан Центр научно-практического образования для подготовки инженерно-ориентированных специалистов в области биоинформатики и генетических технологий. В 2016 г. он был избран действительным членом Российской академии наук, успешно участвует в работе международного консорциума «Протеом человека». Его профессиональная специализация относится к применению информационно-коммуникационных технологий для решения фундаментальных задач в области наук о жизни. В 2005 году ему была присуждена премия Правительства Российской Федерации в области науки и техники для молодых ученых за создание базы знаний по цитохромам P450, в 2010 году — за цикл работ «Концепция обратного числа Авогадро в протеомных исследованиях» он был награждён дипломом премии Российской академии медицинских наук им. В.С. Гулевича за лучшую научную работу по биологической и медицинской химии. Его научное направление отвечает одной из задач диссертационной работы соискателя.

Основные публикации оппонента по тематике диссертационного исследования:

1. Khmeleva S.A., Suprun E.V., Vasileva Yu.A., Ptitsyn K.G., Kurbatov L.K., Shershov V.E., Kuznetsova V.E., Chudinov A.V., Radko S.P., Lisitsa A.V. Effect of poly(da)stretch in a template sequence on the rate and yield of polymerase chain reaction with electroactive modified 2'-deoxyuridine-5'-triphosphates. *Microchemical Journal*. 2024, 207, 111970. doi: 10.1016/j.microc.2024.111970

2. Ponomarenko E.A., Ivanov Yu.D., Valueva A.A., Pleshakova T.O., Zgoda V.G., Vavilov N.E., Ilgisonis E.V., Lisitsa A.V., Archakov A.I. From proteomics to the analysis of single protein molecules. *International Journal of Molecular Sciences*. 2024, 25(19): 10308. doi: 10.3390/ijms251910308
3. Sarygina E., Kozlova A., Deinichenko K., Radko S., Ptitsyn K., Khmeleva S., Kurbatov L.K., Spirin P., Prassolov V.S., Ilgisonis E., Lisitsa A., Ponomarenko E. Principal component analysis of alternative splicing profiles revealed by long-read ont sequencing in human liver tissue and hepatocyte-derived HEPG2 and HUH7 cell lines. *International Journal of Molecular Sciences*. 2023, 24(21): 15502. doi: 10.3390/ijms242115502
4. Vavilov N.E., Ilgisonis E.V., Lisitsa A.V., Ponomarenko E.A., Farafonova T.E., Tikhonova O.V., Zgoda V.G., Archakov A.I. Deep proteomic dataset of human liver samples obtained by two-dimensional sample fractionation coupled with tandem mass spectrometry. *Data in Brief*, 2022, 42, 108055. doi: 10.1016/j.dib.2022.108055
5. Kozlova A., Shkrigunov T., Gusev S., Guseva M., Ponomarenko E., Lisitsa A. An open-source pipeline for processing direct infusion direct mass spectrometry data of the human plasma metabolome. *Metabolites*. 2022, 12(8): 768. doi: 10.3390/metabo12080768

- **Чуев Геннадий Николаевич**, доктор физико-математических наук, является ведущим специалистом в области вычислительной биофизики и вычислительной химии. Им разработан новый мультимасштабный универсальный подход для *in silico* исследований поведения и различных свойств биомакромолекул в растворах. Им была разработана теория и на её основе создан пакет программ для расчёта сольватации биомакромолекул и наночастиц. Созданный пакет программ был включен в состав программно-вычислительного комплекса NWChem. Под его руководством были выполнены исследования гидратации осмолитов-биопротекторов, нейротрансмиттеров, соединений на основе биокатиона холина, белков и их комплексов с лигандами, вирусов, в том числе вируса SARS-CoV2, что также было одной из задач диссертационного исследования.

Основные публикации оппонента по тематике диссертационного исследования:

1. Аракелян А.Г., Чуев Г.Н., Мамедов Т.В., Ариков А., Исмаилов К.Р. Сравнительный анализ динамических особенностей эндолизин T5 и PLYG *in silico*. *Биофизика*, 2025, Т. 70, № 2. С. 295-304. doi: 10.31857/S00063029250820082
2. Arakelian A.G., Chuev G.N., Mamedov T.V. Molecular docking of endolysins for studying peptidoglycan binding mechanism. *Molecules*. 2024(22), 5386. doi: 10.3390/molecules29225386
3. Fedotova M.V., Chuev G.N. The three-dimensional reference interaction site model approach as a promising tool for studying hydrated viruses and their complexes with ligands. *International Journal of Molecular Sciences*. 2024, 25(7), 3697. doi: 10.3390/ijms25073697
4. Мамедов Т., Швирст А., Федотова М.В., Чуев Г.Н. Бесконтактная атомно-силовая микроскопия для исследования биомолекул в жидкости. *Биофизика*, 2024, Т. 69, № 4, С. 723-736. doi: 10.31857/S0006302924040056

5. Kruchinin S.E., Chuev G.N., Fedotova M.V. Molecular insight on hydration of protein tyrosine phosphatase 1B and its complexes with ligands. *Journal of Molecular Liquids*. 2023, 384, 122281. doi: 10.1016/j.molliq.2023.122281

- **Павлов Александр Александрович**, доктор химических наук, является ведущим специалистом в области научного цифрового материаловедения, искусственного интеллекта в химии. Область его интересов включает фундаментальные и прикладные исследования, направленные на решение актуальных научно-исследовательских задач в контексте стратегии научно-технологического развития, в том числе в области создания новых веществ и материалов. Проводимые им исследования поддержаны грантами Президента РФ для ведущих научных школ, грантами Российского научного фонда, Российского фонда фундаментальных исследований. Исследование в области хемоинформатики и молекулярного моделирования для создания новых веществ являлось одной из задач при выполнении диссертационной работы.

Основные публикации оппонента по тематике диссертационного исследования:

1. Koshelev D., Medved'ko A., Vashchenko A., Lepnev L., Goloveshkin A., Maloshitskaya O., Chikineva T., Pavlov A., Roslyakov I.V., Utochnikova V. Synthesis of heteroleptic ytterbium complexes with electron-accepting- and electron-donor-substituted 2-tosylamino-benzylidene-aryloyl-hydrazones for host-free NIR emitting OLEDs. *Inorganic Chemistry Communications*, (Netherlands), 186(2), 116297. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2026.116297>
2. Zakharova D.V., Aysin R.R., Pavlov A.A., Khanin D., Platonova E.O., Nelyubina Y., Polezhaev A. Tandem Diels-Alder reaction overrules entropy: the gate to a thermally stable, yet thermally recyclable furan-based polymers. *Green Chemistry*, Royal Society of Chemistry (U K), 27, 2263-2275 <https://doi.org/10.1039/D4GC04846F>
3. Zlobin I., Toroptsev N., Averochkin G., Pavlov A. Pre-trained Mol2Vec Embeddings as a Tool for Predicting Polymer Properties. *Chinese Journal of Polymer Science (Germany)*, 42, 2059–2068. <https://doi.org/10.1007/s10118-024-3237-y>
4. Belova S.A., Belov A.S., Danshina A.A., Zubavichus Y.V., Aleshin D.Yu, Pavlov A.A., Efimov N.N., Voloshin Y.Z. Effects of solvatomorphism, the nature of a chelating ligand synthon and a counterion on the single crystal XRD structure and SMM properties of paramagnetic monocapped cobalt(II) tris-pyrazoloximates. *Dalton Transactions*, (United Kingdom), 53(4), 1482-1491 <https://doi.org/10.1039/D3DT03025C>
5. Osipova E.S., Kovalenko S.A., Gulyaeva E.S., Kireev N.V., Pavlov A.A., et al. The Dichotomy of Mn–H Bond Cleavage and Kinetic Hydricity of Tricarbonyl Manganese Hydride Complexes. *Molecules*, (Basel, Switzerland), 28(8), 3368; <https://doi.org/10.3390/molecules28083368>

Научная новизна. Диссертационный совет ПДС 0300.025 отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- решена актуальная задача биохимии и математической биологии, биоинформатики, заключающаяся в разработке гибридных атомистически-гидродинамических методов на основе высокопроизводительного компьютерного моделирования больших молекулярных систем в водном растворе; эти методы применены наряду с традиционными подходами молекулярного

моделирования для получения физико-химических характеристик ряда биомолекулярных систем с точностью, количественно совпадающей с экспериментальными биохимическими данными;

- впервые разработана и реализована в программном пакете гибридная модель жидкости, связывающая на основе физически обоснованных фундаментальных принципов атомистическое и континуальное, гидродинамическое описание;
- впервые построена полноатомная модель капсидов двух вирусов, PCV2 и MS2, проведено молекулярно динамическое моделирование этих капсидов, изучены физико-химические свойства системы, включая характеристики зарядов на капсиде, распределение и потоки ионов из раствора; показана критическая роль правильного распределения ионов между внутренним пространством капсида и внешним раствором в стабильности капсида;
- впервые была проанализирована динамика воды и водных растворов с точки зрения теории нелинейных динамических систем, получены характеристики хаотического движения молекул воды, количественно оценена сложность этой динамики; получены количественные характеристики влияния воды на конформационную динамику белков;
- рассчитана константа диссоциации малой молекулы-лиганда изониазида и белка каталазы, количественно совпадающая с экспериментальной величиной этой константы; по результатам моделирования получена свободная энергия взаимодействия ряда новых производных тиазолопиримидина с альбумином, показано количественное совпадение с экспериментально измеренными значениями.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- новый подход в моделировании жидкостей и растворов биологических макромолекул позволяет описывать моделируемую систему одновременно на масштабах, различающихся на несколько порядков, как в пространстве, так и во времени; при этом исследователь может произвольно определять области, в которых атомистическое разрешение необходимо (например, вблизи макромолекул), описывая остальное пространство с помощью экономной гидродинамики без ущерба для качества описания атомистических областей;
- полученные модели капсидов целого вируса с атомистическим разрешением являются особенно важными для обработки результатов современной криоэлектронной микроскопии, которая включает подобное моделирование как необходимый этап в обработке измеренных данных; эта сложность заключается в неравномерном разрешении экспериментально измеренных электронных плотностей, что требует нетривиальных подходов в построении атомистической модели по измеренным данным.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики:

Результаты имеют важное значение для решения прикладных задач биохимии, медицинской химии и экспериментальной медицины: моделирования поведения и взаимодействия белковых и небелковых молекул в водных растворах. Например, полученная константа диссоциации изониазида из активного центра каталазы совпала с экспериментально измеренной величиной в пределах погрешности эксперимента и расчета.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- работа выполнена с использованием современных методов, применяемых в биохимии, математической биологии и биоинформатики;
- выбор методологии обоснован и полностью представлен в тексте работы;
- для проведения исследований в работе использованы современные методики и современное оборудование;
- экспериментальные результаты были получены благодаря расчетам на самых быстрых

суперкомпьютерах в мире.

Личный вклад соискателя состоит в том, что им была разработана концепция и теория описанных новых подходов и методов. Автором был проведён аналитический обзор научной литературы по изучаемой проблеме, планирование, подготовка и проведение всех экспериментов. Автором были проведены все расчёты на суперкомпьютерах с их последующей обработкой на локальных рабочих станциях и компьютерах. Автор инициировал обсуждение полученных результатов с коллегами-экспериментаторами. Все научные положения, выводы и практические рекомендации диссертационной работы сформулированы лично автором.

Проект заключения диссертационного совета подготовлен председателем экспертной комиссии, доктором биологических наук, профессором Муронцом Владимиром Израилевичем, заведующим Отделом биохимии животной клетки НИИ Физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МГУ им. М.В. Ломоносова» и членами комиссии, доктором биологических наук Ждановым Дмитрием Дмитриевичем, главным научным сотрудником, заведующим лабораторией медицинской биотехнологии Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича» и доктором химических наук Пометун Анастасией Александровной, ведущим научным сотрудником, заведующей лабораторией Молекулярной инженерии Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук.

На заседании 3 июля 2026 г. диссертационный совет ПДС 0300.025 принял решение присудить Неруху Дмитрию Александровичу ученую степень - доктор биологических наук по специальностям 1.5.4. Биохимия и 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве **22** человек, из них **9** докторов наук по специальности 1.5.4. Биохимия (биологические науки) и **6** докторов наук по специальности 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика (биологические науки), рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из **26** человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – **22**, против – **0**, недействительных бюллетеней – **0**.

Председательствующий на заседании ПДС 0300.025,
доктор медицинских наук, профессор

В.С. Покровский

Ученый секретарь диссертационного совета ПДС 0300.025,
доктор биологических наук, профессор

Е.В. Лукашева

3 июля 2026 г.

