



ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Онуфриева Алексея Владиславовича на диссертацию Лебеденко Ольги Олеговны на тему «Расчёты измеряемых параметров ЯМР на основе данных МД моделирования биомолекулярных систем: новые методы и приложения», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

The dissertation covers three distinct themes, which make the three chapters in the thesis. The first two chapters focus on development and testing of combined experimental and simulation approaches to characterize intrinsically disordered proteins (IDPs). The problem is highly significant: while up to 40% of the human genome is made up of IDPs, or proteins with intrinsically disordered regions (IDRs), these molecular systems remain vastly underexplored, owing to their lack of defined structures. The candidate's work proposes several "hybrid" methods that help to fill the existing knowledge gap, especially with respect to histone proteins, which are central to the function of human genome. Another noteworthy outcome of this work is a set of timely, best practice recommendations for the broad computational community. The third chapter addresses an interesting problem of ring flips in ubiquitin protein, using a combination of NMR and Molecular Dynamics simulations, offering several insights that should be of interest to the relevant expert community.

On the basis of her work the candidate has published two peer reviewed papers, including one in a top journal in the field (JACS). On both papers the candidate is either the first author or an equal contribution lead author. These are notable achievements that speak for the quality of the candidate's work. The thesis itself contains a plethora of valuable data that did not yet make it to publications (I hope it will, eventually). The thesis is well written, both in terms of scientific rigor and presentation, including English usage. There is little doubt in my mind that this is a solid work, worthy of the degree the candidate seeks.

Диссертация Лебеденко Ольги Олеговны на тему: «Расчёты измеряемых параметров ЯМР на основе данных МД моделирования биомолекулярных систем: новые методы и приложения» **соответствует** основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Лебеденко Ольга Олеговна **заслуживает** присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

Ph.D., профессор Политехнического университета Виргинии.

Онуфриев А. В.

17 декабря 2024 г.

Invent the Future