



« ՀԱՍՏԱՏՈՒՄ ԵՄ »

ՀՀ ԳԱԱ գիտակրթական միջազգային

կենտրոնի տնօրեն

Արմեն Սարգսյան Ա.Ա.

« 08 » հուլիս, 2022թ.

ԱՌԱՋԱՏԱՐ ԿԱԶՄԱԿԵՐՊՈՒԹՅԱՆ ԿԱՐԾԻՔ

Գ.00.02 – Կենսաֆիզիկա, կենսաինֆորմատիկա
մասնագիտությամբ կենսաբանական գիտությունների
թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար
ներկայացված Նարեկ Նվերի Աբելյանի «*Pseudomonas aeruginosa*
մանրէների քվորում-սենսինգի համակարգերի պոտենցիալ
արգելակիչների որոնումը» թեմայով ատենախոսության
վերաբերյալ

Մանրէների կայունության հակաբիոտիկների նկատմամբ այսօր հանդիսանում է կարևորագույն խնդիրներից մեկը, քանի որ հայտնի է, որ կայուն վարակներից մահացության թիվը տարեցտարի ավելանում է: Նմանատիպ հարցերով ՄԱԿ-ում ձևավորված հանձնաժողովի զեկույցների համաձայն, մոտ ապագայում վերջինիս հետ կապված հիվանդությունները կարող են աղետալի վնաս հասցնել երկրագնդի բնակչության պատճառ դառնալով միլիոնների մահվան: Այս առումով ներկայացված ատենախոսությանը կարևոր է և արդիական, որտեղ արձաձվում են նմանատիպ հարցեր:

Ն.Ն. Աբելյանի «*Pseudomonas aeruginosa* մանրէների քվորում-սենսինգի համակարգերի պոտենցիալ արգելակիչների որոնումը» ատենախոսական աշխատանքի նպատակն է որոնել և գնահատել *Pseudomonas aeruginosa* մանրէների քվորում-սենսինգի համակարգերի պոտենցիալ արգելակիչները: Ողջունելի է, որ որպես ուսումնասիրության մեթոդ ատենախոսի կողմից քնտրվել է ժամանակակից կենսաինֆորմատիկայի, համակարգչային մոդելավորման, ինչպես նաև համակարգրային կենսաբանության եղանակները: Աշխատանքում իրականացված փորձերի արդյունքում ստացվել են թե՛ հիմնարար և թե՛ կիրառական հետաքրքրություն ներկայացնող մի շարք կարևորագույն և արդիական արդյունքեր:

Ատենախոսությունը կազմված է ներածությունից, 3 գլուխներից, եզրակացություններից և 126 գրականության ցանկից: Աշխատանքի ընդհանուր ծավալը կազմում է 102 էջ՝ ներառյալ 34 նկար և 5 աղյուսակ: Նշենք, որ առանձին էջով ներկայացված է նաև ատենախոսության մեջ օգտագործվող հապավումներն ու նշանակումները:

Առաջին գլուխը նվիրված է գրական ակնարկին: Այստեղ քննարկվում են աշխատանքներ՝ նվիրված *Pseudomonas aeruginosa* մանրէներին, քվորում-սենսինգի համակարգերին, ինչպես նաև աշխատանքներ՝ կատարված կառուցվածքային կենսաբանության և կենսաինֆորմատիկայի եղանակներով:

Երկրորդ գլուխը նվիրված է հետազոտությունների նյութերին և մեթոդներին: Նկարագրված են ատենախոսության մեջ հետազոտված սպիտակուցները: Մանրամասն նկարագրված է մոլեկուլային դոկինգի, վիրտուալ սկրինինգի և մոլեկուլային դինամիկային մեթոդները: Այս գլխում ներկայացված են աշխատանքի մեջ օգտագործված մոլեկուլային դոկինգի համար նախատեսված AutoDock Vina, rDock, LeDock ծրագրային փաթեթները, մոլեկուլային դինամիկայի AMBER20 ծրագրային փաթեթը, ինչպես նաև վիզուալիզացիայի PyMOL, VMD և այլ փաթեթներ: Նշենք, որ ներկայացված են նաև համապատասխան ուժային դաշտերը (ff14SB, GAFF):

Երրորդ հիմնական գլուխը բաղկացած է հինգ պարագրաֆից, որտեղ քննարկվում են ատենախոսության հիմնական արդյունքները: Մոլեկուլային դոկինգի եղանակով՝ օգտագործելով տարբեր ծրագրային փաթեթներ, մոդելավորվել են քվորում-սենսինգի առանցքային սպիտակուցների՝ LasR, LasI, MvfR փոխազդեցությունը ֆլավոնների և նրանց ածանցյալների հետ: Արդյունքները ցույց են տալիս, որ ֆլավոնային միացությունների ինտենսիվ փոխազդում են *Pseudomonas aeruginosa* մանրէների քվորում-սենսինգի առաջին համակարգի հիմնական սպիտակուցի՝ LasR-ի երկու կայքերի հետ՝ LBD և DBD: Կատարվել է նաև ազատ էներգիայի հաշվարկ օգտագործելով MM-GBSA/PBSA մեթոդը: Նշված փորձերը վավերացնելու համար, կատարվել է մոլեկուլային դինամիկ սիմուլացիաներ, որի արդյունքում հաստատվել է, որ ատոմների միջին քառակուսային շեղումը չի գերազանցում 1-1.5Å -ը, որը

խոսում է այն մասին, որ ուսումնասիրվող համակարգերը զգալի փոփոխության չեն ենթարկվում:

Նշենք նաև, որ նշված միացությունների համան հաշվարկվել են նրանց ֆիզիկաքիմիական հատկությունները, ինչպես նաև կանխատեսվել են ADMET պարամետրերը մի շարք հայտնի ծրագրային փաթեթների օգնությամբ:

Ատենախոսության վերավերյալ դիտողություններ չկան, այն գրված է պարզ և հասկանալի լեզվով և թողնում է բավականին լավ տպավորություն:

Աշխատանքում ստացված արդյունքները կարող են օգտագործվել Երևանի պետական բժշկական համալսարանում, Երևանի պետական համալսարանում և ՀՀ ԳԱԱ գիտակրթական միջազգային կենտրոնում: Սեղմագիրը համապատասխանում է ատենախոսության բովանդակությունը:

Ատենախոսություն մանրամասն քննարկվել է ՀՀ ԳԱԱ գիտակրթական միջազգային կենտրոնի սեմինարում 2022 թ. հուլիսի 4-ին /թիվ 5 արձանագրություն/: Սեմինարին ներկա էին ֆիզ.-մաթ գիտ. դոկտոր, դոցենտ Ա.Հ. Պողոսյանը, ֆիզ.-մաթ գիտ. թեկնածու Լ. Հ. Արսենյանը, ֆիզ.-մաթ գիտ. թեկնածու Հ.Հ. Ղարաբեկյանը, ամբիոնի աշխատակից Ա. Մելտոնյանը և ուրիշներ:

Կարելի է պնդել, որ Ն.Ն. Աբելյանի ատենախոսական աշխատանքը իրականացվել է բարձր գիտական մակարդակով և բավարարում է թեկնածուական ատենախոսությունների նկատմամբ ՀՀ ԲՈՂ-ի հիմնական պահանջներին, իսկ նրա հեղինակը արժանի է կենսաբանական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

ՀՀ ԳԱԱ ԳԿՄԿ Կենսահինֆորմատիկայի
լաբորատորիայի վարիչ,
ֆիզ.-մաթ գիտ. դոկտոր, դոցենտ

Ա.Հ. Պողոսյան

Ա.Հ. Պողոսյանի ստորագրությունները հաստատում են՝
ՀՀ ԳԱԱ ԳԿՄԿ գիտական քարտուղար

Մ.Ա. Մարգարյան

