

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Новичковой Даны Александровны
«Молекулярное моделирование структурно-динамических и каталитических характеристик холинэстераз различных типов»

1. Ф.И.О.: Коваленко Илья Борисович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Научная специальность: 03.01.02 – Биофизика

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: биологический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, кафедра биофизики, проблемная лаборатория космической биологии.

Адрес места работы: 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12.

Тел.: +7 (495) 9390289

E-mail: ikovalenko78@gmail.com

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Todorenko D., Timofeev N., Kovalenko I.B., Kukarskikh G.P., Matorin D.N., Antal T.K. Chromium effects on photosynthetic electron transport in pea (*Pisum sativum* L.)// *Planta*, 2020, V. 251, p.11
2. Gudimchuk Nikita B., Kholina Ekaterina G., Fedorov Vladimir Andreevich, Dreval Varvara D., Kovalenko I.B. Microtubule protofilament bending characterization// *Computer Research and Modeling*, 2020. V. 12 №2 p. 435-443
3. Fedorov V.A., Kovalenko I.B., Khrushev S.S., Ustinin D.M., Antal T.K., Riznichenko G.Yu, Rubin A.B. Comparative analysis of plastocyanin-cytochrome f complex formation in higher plants, green algae and cyanobacteria// *Physiologia Plantarum* V.166 №1 P. 320-335
4. Fedorov Vladimir A., Orekhov Philipp S., Kholina Ekaterina G., Zhmurov Artem A., Ataullakhanov Fazoil I., Kovalenko Ilya B., Gudimchuk Nikita B. Mechanical properties of tubulin intra- and inter-dimer interfaces and their implications for microtubule dynamic instability// *PLoS Computational Biology*, 2019, V. 15 №8 e1007327
5. Orekhov Philipp S., Kholina Ekaterina G., Bozdaganyan Marine E., Nesterenko Alexey M., Kovalenko Ilya B., Strakhovskaya Marina G. Molecular Mechanism of Uptake of Cationic Photoantimicrobial Phthalocyanine across Bacterial Membranes Revealed by Molecular Dynamics Simulations// *Journal of Physical Chemistry B*, 2018, V. 122 № 14 p. 3711-3722

2. Ф.И.О.: Никулин Алексей Донатович

Ученая степень: доктор химических наук

Научная специальность: 02.00.10 - Биоорганическая химия, 03.01.03 - Молекулярная биология

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт белка Российской академии наук», лаборатория структурных исследований аппарата трансляции

Адрес места работы: 142290 Московская область, г. Пущино, ул. Институтская, 4

Тел.: 8(4967)318425

E-mail: nikulin@vega.protres.ru

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Revtovich Svetlana, Morozova Elena, Kulikova Vitalia, Koval Vasiliy, Anufrieva Natalya, Nikulin Alexei, Demidkina Tatyana. Sulfoxides of sulfur-containing amino acids are suicide substrates of *Citrobacter freundii* methionine gamma-lyase. Structural bases of the enzyme inactivation// *Biochimie*, 2020, v. 168, p 190-197
2. Purtov YA, Tutukina MN, Nikulin AD, Ozoline ON. The Topology of the Contacts of Potential Ligands for the UxuR Transcription Factor of *Escherichia coli* as Revealed by Flexible Molecular Docking// *Biophysics*, 2019, V.64, №1, p 49-56
3. Nemchinova Maria, Balobanov Vitaly, Nikonova Ekaterina, Lekontseva Natalia, Mikhaylina Alisa, Tishchenko Svetlana, Nikulin Alexey. An Experimental Tool to Estimate the Probability of a Nucleotide Presence in the Crystal Structures of the Nucleotide-Protein Complexes// *Protein Journal*, 2017, V.36, № 3, p. 157-165
4. Revtovich S.V., Morozova E.A., Kulikova V.V., Anufrieva N.V., Osipova T.I., Koval V.S., Nikulin A.D., Demidkina T.V. Crystal structure of mutant form Cys115His of *Citrobacter freundii* methionine γ -lyase complexed with L-norleucine// *Biochimica et biophysica acta*, 2017, V.1856, p. 1123-1128
5. Katina Natalya S., Balobariov Vitalii A., Ilyina Nelly B., Vasiliev Victor D., Marchenkov Victor V., Glukhov Anatoly S., Nikulin Alexey D., Bychkova Valentina E. sw ApoMb Amyloid Aggregation under Nondenaturing Conditions: The Role of Native Structure Stability// *Biophysical Journal*, 2017, V.113, № 5, p. 991-1001

3. Ф.И.О.: Мазо Михаил Абрамович

Ученая степень: кандидат физико-математических наук

Научная специальность: 01.04.19 – физика и механика полимеров

Должность: старший научный сотрудник

Место работы: Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, лаборатория физики и механики полимеров

Адрес места работы: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4

Тел.: 8(495)939-75-15.

E-mail: mazo@polymer.chph.ras.ru

1. Kurbatov Andrey O., Balabaev Nikolay K., Mazo Mikhail A., Kramarenko Elena Yu. Effects of generation number, spacer length and temperature on the structure and intramolecular dynamics of siloxane dendrimer melts: molecular dynamics simulations// Soft Matter, 2020 V.16, p. 3792-3805
2. Балабаев Н.К., Стрельникова И.А., Мазо М.А., Гусарова Е.Б., Родникова М.Н., Краевский С.В. Описание структуры пространственных сеток водородных связей в жидкостях методом Вороного-Делоне// Журнал физической химии, 2019, т. 93 №6, с. 866-871
3. Mikhail Mazo, Nikolay Balabaev, Alexander Alentiev, Ivan Strelnikov, Yuri Yampolskii. Structure and properties of high and low free volume polymers studied by molecular dynamics simulation// Computation, 2019, V.7 №2 p.27
4. A.V. Savin, R.A. Sakovich, M.A. Mazo. Using spiral chain models for study of nanoscroll structures// Physical Review B, 2018, V.97, article 165436
5. Natalia A Kovaleva, I.P/ Koroleva, Mikhail A. Mazo, Elena A. Zubova. The "sugar" coarse-grained DNA model// Journal of molecular modeling, 2017, V.23 №2, p. 66

Ученый секретарь

диссертационного совета МГУ.02.08

к.х.н. Сакодынская И.К.

