

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации *Кривицкой Александры Вячеславовны*
«Молекулярное моделирование механизмов ферментативных реакций, связанных с
бактериальной резистентностью к β -лактамным антибиотикам»

1. Ф.И.О.: Шайтан Алексей Константинович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: член-корреспондент РАН

Научная специальность: 03.01.09 - Математическая биология, биоинформатика
(физико-математические науки)

Должность: профессор кафедры биоинженерии

Место работы: ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени
М.В. Ломоносова», биологический факультет

Адрес места работы: 119234, Россия, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12.

Тел.: +7(495)-939-57-38

E-mail: shaytan_ak@mail.bio.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности(тям) и/или проблематике
оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. Shaytan A., Armeev G. A., Oleinikov P. D., Motorin N. A., Singh-Palchevskaya L., Sivkina A. L., Feskin P. G., Komarova G. A., Kirpichnikov M. P., Feofanov A. V., Afonin D. A., Fedulova A. S., Studitsky V. M., Glukhov G. S. Interactions of nucleosomes with acidic patch binding peptides: Combining structural analysis, MD simulations, and experiments // *Biophysical Journal*. – 2024. – V. 123. – № 3. – P. 3a.
2. Oleinikov P. D., Fedulova A. S., Armeev G. A., Motorin N. A., Singh-Palchevskaya L., Sivkina A. L., Feskin P. G., Glukhov G. S., Afonin D. A., Komarova G. A., Kirpichnikov M. P., Studitsky V. M., Feofanov A. V., Shaytan A. K. Interactions of Nucleosomes with Acidic Patch-Binding Peptides: A Combined Structural Bioinformatics, Molecular Modeling, Fluorescence Polarization, and Single-Molecule FRET Study // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – V. 24. – № 20. – P. 15194.
3. Stefanova M. E., Volokh O. I., Chertkov O. V., Armeev G. A., Shaytan A. K., Feofanov A. V., Kirpichnikov M. P., Sokolova O. S., Studitsky V. M. Structure and Dynamics of Compact Dinucleosomes: Analysis by Electron Microscopy and spFRET // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – V. 24. – № 15. – P. 12127.
4. Косарим Н.А., Армеев Г.А., Кирпичников М.П., Шайтан А.К. Analysis of Ion Atmosphere Around Nucleosomes Using Supercomputer MD Simulations // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. – 2022. – V. 9. – № 2. – P. 56-67.
5. Novikov R., Kacher J., Gribkova A., Zaytsev P., Armeev G., Glukhov G., Shaytan A. Modeling of tandem dCas9 complexes bound to DNA for nucleic acids detection // *Microscopy and Microanalysis*. – 2021. – V. 27. – № S1. – P. 1696-1698.

2. Ф.И.О.: Щекотихин Андрей Егорович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор, профессор РАН

Научная специальность: 02.00.03 – Органическая химия (химические науки)

Должность: директор ФГБНУ "Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе", зав. лабораторией химической трансформации антибиотиков

Место работы: ФГБНУ "Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе"

Адрес места работы: 119021, г. Москва, Большая Пироговская ул., 11.

Тел.: +7 499 246-99-80

E-mail: shchekotikhin@mail.ru

Список основных научных публикаций по специальности(тям) и/или проблематике оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. Krymov S. K., Salnikova D. I., Dezhenkova L. G., Bogdanov F. B., Korlyukov A. A., Scherbakov A. M., Shchekotikhin A. E. Synthesis and Biological Evaluation of Chalconesulfonamides: En Route to Proapoptotic Agents with Antiestrogenic Potency // *Pharmaceuticals*. – 2024. – V. 17. – №. 1. – P. 1-19.
2. Tevyashova A., Efimova S., Alexandrov A., Omelchuk O., Ghazy E., Bychkova E., Zatonsky G., Grammatikova N., Dezhenkova L., Solovieva S., Ostroumova O., Shchekotikhin, A. Semisynthetic Amides of Amphotericin B and Nystatin A1: A Comparative Study of In Vitro Activity/Toxicity Ratio in Relation to Selectivity to Ergosterol Membranes // *Antibiotics*. – 2023. – V. 12. – №. 1. – P. 151.
3. Tevyashova A. N., Efimova S. S., Alexandrov A. I., Ghazy E. S., Bychkova E. N., Solovieva S. E., Zatonsky G. B., Grammatikova N. E., Dezhenkova L. G., Pereverzeva E. R., Isakova E. B., Ostroumova O. S., Omelchuk O. A., Muravieva V. V., Krotova M. M., Priputnevich T. V., Shchekotikhin, A. E. Semisynthetic Amides of Polyene Antibiotic Natamycin // *ACS Infectious Diseases*. – 2022. – V. 9. – №. 1. – P. 42-55.
4. Buravchenko G. I., Maslov D. A., Alam M. S., Grammatikova N. E., Frolova S. G., Vatlin A. A., Tian X., Ivanov I. V., Bekker O. B., Kryakvin M. A., Dontsova O. A., Danilenko V. N., Zhang T., Shchekotikhin, A. E., Synthesis and Characterization of Novel 2-Acyl-3-trifluoromethylquinoxaline 1, 4-Dioxides as Potential Antimicrobial Agents // *Pharmaceuticals*. – 2022. – V. 15. – №. 2. – P. 155.
5. Tikhomirov A. S., Litvinova V. A., Andreeva D. V., Tsvetkov V. B., Dezhenkova L. G., Volodina Y. L., Kaluzhny D. N., Treshalin M. I., Schols D., Romanova A. A., Moisenovich M. M., Shtil A. A., Shchekotikhin, A. E., Amides of pyrrole- and thiophene-fused anthraquinone derivatives: A role of the heterocyclic core in antitumor properties // *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2020. – V. 199. – P. 112294.

3. Ф.И.О.: Полынская Юлия Геннадьевна

Ученая степень: кандидат физико-математических наук

Ученое звание: без ученого звания

Научные специальности: 02.00.04 - Физическая химия, 02.00.17 - Математическая и квантовая химия (физико-математические науки)

Должность: научный сотрудник отдела материаловедения

Место работы: ООО "Кинтех Лаб"

Адрес места работы: 123298, г. Москва, 3-я Хорошевская ул., 12.

Тел.: 8(916)698-51-64

E-mail: yupol@kintechlab.com

Список основных научных публикаций по специальности(тям) и/или проблематике
оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. Polynskaya Y. G., Matsokin N. A., Sinitsa A. S., Knizhnik A. A., Potapkin B. V. First-principles investigation of interaction between the atomic oxygen species and carbon nanostructures // *Carbon Trends*. – 2022. – V. 9. – P. 100201.
2. Sinitsa S. A., Lebedeva I. V., Polynskaya Y. G., De Oteyza D. G., Ratkevich S. V., Knizhnik A. A., Popov A. M., Poklonski N. A., Lozovik Y. E. Transformation of a graphene nanoribbon into a hybrid 1D nanoobject with alternating double chains and polycyclic regions // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2021. – V. 23. – P. 425-441.
3. Knizhnik A.A., Polynskaya Y.G., Sinitsa A.S., Kuznetsov N.M., Belousov S.I., Chvalun S.N., Potapkin B.V. Analysis of structural organization and interaction mechanisms of detonation nanodiamond particles in hydrosols // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2021. – V. 23. – P. 674-682.
4. Sinitsa A.S., Lebedeva I.V., Polynskaya Y.G., Popov A.M., Knizhnik A.A. Molecular dynamics study of sp-Defect migration in odd fullerene: possible role in synthesis of abundant isomers of fullerenes // *Journal of Physical Chemistry C*. – 2020. – V. 124. – P. 11652-11661.
5. Polynskaya J.G., Lebedev A.V., Knizhnik A.A., Sinitsa A.S., Smirnov R.V., Potapkin B.V. Influence of charge state and active site structure of tetrahedral copper and silver clusters on the methane activation // *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*. – 2019. – V. 1147. – P. 51-61.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.015.5,
П.В. Фурсова

25.04.2024