

**Сведения об официальных оппонентах  
по диссертации Метелешко Юлии Игоревны**

*«Молекулярное моделирование мутантных форм флуоресцентных белков на основе LOV доменов с измененными спектральными свойствами», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия*

**1. Ф.И.О.: Коваленко Илья Борисович**

**Ученая степень:** доктор физико-математических наук

**Ученое звание:** без ученого звания

**Научная(ые) специальность(и):** 03.01.02 – Биофизика

**Должность:** ведущий научный сотрудник

**Место работы:** Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Кафедра биофизики, проблемная лаборатория космической биологии

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

**Тел. :** +7(495)939-02-89

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

1. Kholina E., Kovalenko I., Rubin A., Strakhovskaya M. Insights into the Formation of Intermolecular Complexes of Fluorescent Probe 10-N-Nonyl Acridine Orange with Cardiolipin and Phosphatidylglycerol in Bacterial Plasma Membrane by Molecular Modeling // *Molecules*. – 2023. – Vol. 28, № 4. – P. 1929.
2. Fedorov V., Kholina E., Khruschev S., Kovalenko I., Rubin A., Strakhovskaya M. Electrostatic map of the SARS-CoV-2 virion specifies binding sites of the antiviral cationic photosensitizer // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2022. – Vol. 23, № 13. – P. 7304.
3. Г.Ю. Ризниченко, Н.Е. Беляева, И.Б. Коваленко и др. Математическое моделирование электронного транспорта в первичных процессах фотосинтеза // *Биохимия*. — 2022. — Т.87, вып. 10. — С. 1350-1371.
4. G. Yu. Riznichenko, T. K. Antal, N. E. Belyaeva, S. S. Khruschev, I. B. Kovalenko, A.S. Maslakov, T. Yu. Plyusnina, V. A. Fedorov, A. B. Rubin. Molecular, Brownian, kinetic and stochastic models of the processes in photosynthetic membrane of green plants and microalgae // *Biophysical Reviews*. — 2022. — Vol. 14. — P. 985-1004.
5. J. Chen, E. Kholina, A. Szyk, V. Fedorov, I. Kovalenko, N. Gudimchuk, A. Roll-Mecak. Alpha-tubulin tail modifications regulate microtubule stability through selective effector recruitment, not changes in intrinsic polymer dynamics / *Developmental Cell*. — 2021. — Vol. 56. — P. 1-13.
6. V. Fedorov, E. Kholina, S. Khruschev, I. Kovalenko, A. Rubin, M. Strakhovskaya. What binds cationic photosensitizers better: Brownian dynamics reveals key interaction sites on spike proteins of SARS-CoV, MERS-CoV, and SARS-CoV-2 // *Viruses*. — 2021. — Vol. 13, no. 8. — P. 1615.
7. K. Sharshov, M. Solomatina, O. Kurskaya, I. Kovalenko, E. Kholina, V. Fedorov, G. Meerovich, A. Rubin, M. Strakhovskaya. The photosensitizer octakis(cholinyl)zinc phthalocyanine with ability to bind to a model spike protein leads to a loss of SARS-COV-2 infectivity in vitro when exposed to far-red led // *Viruses*. — 2021. — Vol. 13, no. 4. — P. 643.



8. E. G. Kholina, I. B. Kovalenko, M. E. Bozdaganyan, M.G. Strakhovskaya, P.S. Orekhov. Cationic antiseptics facilitate pore formation in model bacterial membranes // *Journal of Physical Chemistry B*. — 2020. — Vol. 124, no. 39, — P. 8593-8600.
9. V.A. Fedorov, E.G. Kholina, I.B. Kovalenko, N.B. Gudimchuk, P.S. Orekhov, A.A. Zhmurov. Update on performance analysis of different computational architectures: Molecular dynamics in application to protein-protein interactions // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2020. — Vol. 7, no. 4. — P. 62-67.
10. V. A. Fedorov, I. B. Kovalenko, S. S. Khruschev et al. Comparative analysis of plastocyanin-cytochrome f complex formation in higher plants, green algae and cyanobacteria // *Physiologia Plantarum*. — 2019. — V. 166, No. 1. — P. 320-335
11. V. A. Fedorov, P. S. Orekhov, E. G. Kholina, A. A. Zhmurov, F. L. Ataulakhanov, I. B. Kovalenko, N. B. Gudimchuk. Mechanical properties of tubulin intra- and inter-dimer interfaces and their implications for microtubule dynamic instability // *PLoS Computational Biology*. — 2019. — Vol. 15, no. 8. — P. 1007327.
12. P. S. Orekhov, I. V. Kirillov, V. A. Fedorov, I. B. Kovalenko, N. B. Gudimchuk, A. A. Zhmurov. Parametrization of the elastic network model using high-throughput parallel molecular dynamics simulations / *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2019. — Vol. 6, no. 1. — P. 19-22.
13. P.S. Orekhov, E.G. Kholina, M.E. Bozdaganyan, A.M. Nesterenko, I.B. Kovalenko, M.G. Strakhovskaya. Molecular mechanism of uptake of cationic photoantimicrobial phthalocyanine across bacterial membranes revealed by molecular dynamics simulations // *Journal of Physical Chemistry B*. — 2018. — Vol. 122, no. 14. — P. 3711-3722.

**2. Ф.И.О.:** Свитанько Игорь Валентинович

**Ученая степень:** доктор химических наук

**Ученое звание:** звания нет

**Научная(ые) специальность(и):** 02.00.03 – Органическая химия

**Должность:** ведущий научный сотрудник

**Место работы:** Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, лаборатория молекулярного моделирования и направленного синтеза

**Адрес места работы:** г. Москва, Ленинский проспект, 47

**Тел.:** +7(499)137-87-09

**E-mail:** svitanko@ioc.ac.ru

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

1. Medvedev M.G., Stroganov O. V., Dmitrienko A.O., Panova M. V., Lisov A.A., Svitanko I. V., Novikov F.N., Chilov G.G. Reducing false-positive rates in virtual screening via cancellation of systematic errors in the scoring function // *Mendeleev Communications*. – 2022. – Vol. 32, № 6. – P. 735–738.
2. Titov I.Y., Stroylov V.S., Rusina P., Svitanko I. V. Preliminary modelling as the first stage of targeted organic synthesis // *Russian Chemical Reviews*. – 2021. – Vol. 90, № 7. – P. 831–867.
3. Stroylov V.S., Svitanko I. V. Computational identification of disulfiram and neratinib as putative SARS-CoV-2 main protease inhibitors // *Mendeleev Communications*. – 2020. – Vol. 30, № 4. – P. 419–420.



4. Stroylov V.S., Svitanko I. V., Maksimenko A.S., Kislyi V.P., Semenova M.N., Semenov V. V. Computational modeling and target synthesis of monomethoxy-substituted o-diphenylisoxazoles with unexpectedly high antimetabolic microtubule destabilizing activity // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. – 2020. – Vol. 30, № 23. – P. 127608.
5. Novikov F.N., Stroylov V.S., Svitanko I.V., Nebolsin V.E. Molecular basis of COVID-19 pathogenesis // *Russian Chemical Reviews*. – 2020. – Vol. 89, №8. – P. 858-878.
6. Rusina P. V., Titov I.Y., Panova M. V., Stroylov V.S., Abdyusheva Y.R., Murlatova E.Y., Svitanko I. V., Novikov F.N. Modeling of novel CDK7 inhibitors activity by molecular dynamics and free energy perturbation methods // *Mendeleev Communications*. – 2020. – Vol. 30, № 4. – P. 430–432.

**3. Ф.И.О.:** Шайтан Константин Вольдемарович

**Ученая степень:** доктор физико-математических наук

**Ученое звание:** профессор

**Научная(ые) специальность(и):** 03.01.02 - Биофизика

**Должность:** профессор

**Место работы:** Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедра биоинженерии

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

**Тел.:** +7(495)939-17-45

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

1. Orekhov P.S., Bozdaganyan M.E., Voskoboynikova N., Mulkidjanian A.Y., Karlova M.G., Yudenko A., Remeeva A., Ryzhykau Y.L., Gushchin I., Gordeliy V.I., Sokolova O.S., Steinhoff H.-J., Kirpichnikov M.P., Shaitan K. V. Mechanisms of Formation, Structure, and Dynamics of Lipoprotein Discs Stabilized by Amphiphilic Copolymers: A Comprehensive Review // *Nanomaterials*. – 2022. – Vol. 12, № 3. – P. 361.
2. Gerasimova N.S., Korovina A.N., Afonin D.A., Shaitan K. V., Feofanov A. V., Studitsky V.M. Analysis of Structure of Elongation Complexes in Polyacrylamide Gel with Förster Resonance Energy Transfer Technique // *Biophysics*. – 2022. – Vol. 67, № 2. – P. 165–170.
3. Bozdaganyan M.E., Shaitan K. V., Kirpichnikov M.P., Sokolova O.S., Orekhov P.S. Computational Analysis of Mutations in the Receptor-Binding Domain of SARS-CoV-2 Spike and Their Effects on Antibody Binding // *Viruses*. – 2022. – Vol. 14, № 2. – P. 295.
4. Voskoboynikova N., Orekhov P., Bozdaganyan M., Kodde F., Rademacher M., Schowe M., Budke-Gieseck A., Brickwedde B., Psathaki O.-E., Mulkidjanian A.Y., Cosentino K., Shaitan K. V., Steinhoff H.-J. Lipid Dynamics in Diisobutylene-Maleic Acid (DIBMA) Lipid Particles in Presence of Sensory Rhodopsin II // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2021. – Vol. 22, № 5. – P. 2548.
5. Karlova M., Bagrov D., Vorobyova M., Mamatkulov K., Arzumanyan G., Sokolova O., Shaitan K. Raman spectroscopy reveals lipids in protein-containing SMA-stabilized lipodiscs // *Microscopy and Microanalysis*. – 2021. – Vol. 27, № S1. – P. 1714–1715.

6. Colbasevici A., Voskoboynikova N., Orekhov P.S., Bozdaganyan M.E., Karlova M.G., Sokolova O.S., Klare J.P., Mulkidjanian A.Y., Shaitan K. V., Steinhoff H.-J. Lipid dynamics in nanoparticles formed by maleic acid-containing copolymers: EPR spectroscopy and molecular dynamics simulations // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes*. – 2020 . – Vol. 1862, № 5. – P. 183207.
7. Bessonov I., Moysenovich A., Arkhipova A., Ezernitskaya M., Efremov Y., Solodilov V., Timashev P., Shaytan K., Shtil A., Moisenovich M. The Mechanical Properties, Secondary Structure, and Osteogenic Activity of Photopolymerized Fibroin // *Polymers*. – 2020 . – Vol. 12, № 3. – P. 646.
8. Sokolova A.I., Pavlova E.R., Khramova Y. V., Klinov D. V., Shaitan K. V., Bagrov D. V. Imaging human keratinocytes grown on electrospun mats by scanning electron microscopy // *Microscopy Research and Technique*. – 2019 . – Vol. 82, № 5. – P. 544–549.
9. Bozdaganyan M.E., Lokhmatikov A. V., Voskoboynikova N., Cherepanov D.A., Steinhoff H.-J., Shaitan K. V., Mulkidjanian A.Y. Proton leakage across lipid bilayers: Oxygen atoms of phospholipid ester linkers align water molecules into transmembrane water wires // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics*. – 2019 . – Vol. 1860, № 6. – P. 439–451.

Учёный секретарь диссертационного совета МГУ.014.3  
Кандидат химических наук, доцент  
М.И. Шилина

