

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Мулашкиной Татьяны Игоревны
«Определение механизмов разрыва Р-О связи в активных центрах ферментов методами молекулярного моделирования»

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

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без звания, член-корреспондент РАН

Научная(ые) специальность(и): 03.01.09 - Математическая биология, биоинформатика (физ.-мат. науки)

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Должность: профессор кафедры биоинженерии биологического факультета

Адрес места работы: 119234, г. Москва, Ленинские горы, 1, строение 73

Тел.: 8 (495) 939-57-38

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

Второе место работы: Национальный исследовательский университет «высшая школа экономики»

Должность: ведущий научный сотрудник международной лаборатории биоинформатики факультета компьютерных наук

Адрес места работы: 109028, г. Москва, Покровский бульвар, д. 11

Тел.:

E-mail:

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-Palchevskaia 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. Kosarim N.A., Armeev G.A., Kirpichnikov M.P., **Shaytan A.K.** 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., Gluhov 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.: Палюлин Владимир Александрович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

Научная(ые) специальность(и): 02.00.03 - Органическая химия (хим. науки)

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Должность: ведущий научный сотрудник кафедры медицинской химии и тонкого органического синтеза химического факультета

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, 1, строение 3

Тел.: 8 (495) 939-39-69

E-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

Второе место работы: Федеральный исследовательский центр проблем химической физики медицинской химии Российской академии наук

Должность: ведущий научный сотрудник Отдела медицинской и биологической химии

Адрес места работы: 142432, г. Черноголовка, пр. академика Н.Н. Семенова, д. 1

Тел.: 8 (495) 939-39-69

E-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

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

1. Shaimardanov A.R., Shulga D.A., **Palyulin V. A.** Do electrostatic interactions make a difference in physics - based AutoDock4 scoring function? //Journal of computational chemistry. – 2024. – Vol. 45, №. 21. – P. 1806-1820.
2. Shaimardanov A.R., Shulga D. A., **Palyulin V. A.** On hidden anisotropy of formally charged fragments //Journal of Computational Chemistry. – 2023. – Vol. 44, №. 13. – P. 1312-1315.
3. Fomina A.D., Uvarova V.I., Kozlovskaya L.I., **Palyulin V.A.**, Osolodkin D.I., Ishmukhametov A. A. Ensemble docking based virtual screening of SARS - CoV - 2 main protease inhibitors //Molecular Informatics. – 2024. – Vol. 43, №. 8. – P. e202300279.
4. Vasyankin A.V., Panteleev S.V., Steshin I.S., Shirokova E.A., Rozhkov A.V., Livshits G.D., Radchenko E.V., Ignatov S.K., **Palyulin V.A.** Temperature-induced restructuring of mycolic acid bilayers modeling the mycobacterium tuberculosis outer membrane: A molecular dynamics study //Molecules. – 2024. – Vol. 29, №. 3. – P. 696.
5. Savintseva L.A., Steshin I.S., Avdoshin A.A., Panteleev S.V., Rozhkov A.V., Shirokova E.A., Livshits G. D., Vasyankin A.V., Radchenko E. V., Ignatov S.K.,

Palyulin V.A. Conformational dynamics and stability of bilayers formed by mycolic acids from the *Mycobacterium tuberculosis* outer membrane //Molecules. – 2023. – Т. 28. – №. 3. – С. 1347.

3. Ф.И.О.: Крупянский Юрий Фёдорович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без звания

Научная(ые) специальность(и): 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экспериментальных состояний вещества (физ.-мат. науки)

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук

Должность: главный научный сотрудник отдела строения вещества

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

Тел.: 8(495)939-73-00

E-mail: yufk@chph.ras.ru

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

1. Tereshkina K. B., Kovalenko V. V., Manuvera V. A., Tereshkin E. V., Potokina V. V., **Krupyanskii Y. F.**, Loiko N. G. Mechanisms of influence of divalent Mg cation on DNA–Dps complex revealed by molecular modeling methods //Mendelev Communications. – 2025. – Vol. 35, №. 3. – P. 307-309.
2. Tereshkina K. B., Tereshkin E. V., Kovalenko V. V., **Krupyanskii Y. F.**, Loiko N. G. Mechanisms of action of the antibiotic ciprofloxacin on the DNA-binding protein Dps detected by molecular modeling techniques //Mendelev Communications. – 2025. – Vol. 35, №. 2. – P. 148-151.
3. Tereshkin E. V., Tereshkina K. B., Loiko N. G., Kovalenko V. V., **Krupyanskii Y. F.** Peculiarities of DNA Binding to Two-Dimensional Crystals of Bacterial Protein DPS from *Escherichia coli* Based on Molecular Dynamics Data //Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2024. – Vol. 18., №. 6. – P. 1604-1611.
4. Tereshkin E. V., Tereshkina K. B., Loiko N. G., Generalova A. A., Kovalenko V. V., **Krupyanskii Y. F.** Mechanisms of interaction of *Escherichia coli* biopolymers with 4-hexylresorcinol //Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2023. – Vol. 17, №. 3. – P. 608-619.
5. Tereshkin E. V., Tereshkina K. B., **Krupyanskii Y. F.** Predicting Binding Free Energies for DPS Protein-DNA Complexes and Crystals Using Molecular Dynamics //Supercomputing Frontiers and Innovations. – 2022. – Vol. 9., №. 2. – P. 33-45.

Ученый секретарь

диссертационного совета МГУ 014.3,

М.И. Шилина
