

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Богдановой Елизаветы Александровны
«Предсказание аффинности в белок-белковых комплексах на основе межатомных расстояний с использованием трёхмерной свёрточной нейронной сети»

1. Ф.И.О.: Коваленко Илья Борисович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без ученого звания

Научная специальность: 03.01.02 - Биофизика

Должность: ведущий научный сотрудник кафедры биофизики, Биологический факультет

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

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

Тел.: +7(495)9390289

E-mail: kovalenko@biophys.msu.ru

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

1. **Kovalenko Ilya**, Fedorov Vladimir, Khrushev Sergei, Antal Taras, Riznichenko Galina, Rubin Andrey. Plastocyanin and Cytochrome f Complex Structures Obtained by NMR, Molecular Dynamics, and AlphaFold 3 Methods Compared to Cryo-EM Data // *International Journal of Molecular Sciences*, 2024, том 25, № 20, -11083.
2. Fedorov V.A., Kholina E.G., Bulatov M.F., **Kovalenko I.B.** Design of a Molecular Dynamics Model for High-Performance Computing of Conformational Changes in Microtubule Protofilaments Associated with the Anticancer Drug Taxol // *Математическая биология и биоинформатика*, 2023, том 18, № 1, -105-112.
3. Vasyuchenko E.P., Fedorov V.A., Kholina E.G., Khrushev S.S., **Kovalenko I.B.**, Strakhovskaya M.G. Calculation of Electrostatic Potential Field of Coronavirus S Proteins for Brownian Dynamics Simulations // *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 2022, том 9, № 3, -65-71.
4. Fedorov V., Kholina E., Khrushev S., **Kovalenko I.**, Rubin A., Strakhovskaya M. 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, том 13, № 8, -1615.
5. Fedorov V.A., Kholina E.G., **Kovalenko I.B.**, Gudimchuk N.B., Orekhov P.S., Zhmurov A.A. Update on Performance Analysis of Different Computational Architectures: Molecular Dynamics in Application to Protein-Protein Interactions // *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 2020, том 7, № 4, -62-67

2. Ф.И.О.: Хренова Мария Григорьевна

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: 02.00.17 - Математическая и квантовая химия

Должность: профессор кафедры физической химии, Химический факультет

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

Адрес места работы: 119991, г. Москва, Ленинские горы, МГУ, д. 1, стр. 3

Тел.: +7(495)9394840

E-mail: khrenovamg@my.msu.ru

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

1. Zakharova T.M., Kulakova A.M., Krinitsky M.A., Varentsov M.I., **Khrenova M.G.** Determination of the Dipole Moment Variation Upon Excitation in the Chromophore of Green Fluorescent Protein From Molecular Dynamic Trajectories with QM/MM Potentials Using Machine Learning Methods // *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2024, том 98, № 11, -2602-2607.
2. Richter Martina, **Khrenova Maria**, Kazakova Elena, Riabova Olga, Egorova Anna, Makarov Vadim, Schmidtke Michaela. Dynamic features of virus protein 1 and substitutions in the 3-phenyl ring determine the potency and broad-spectrum activity of capsid-binding pyrazolo[3,4-d]pyrimidines against rhinoviruses // *Antiviral Research*, 2024, том 231, -105993.
3. Grigorenko B.L., Polyakov I.V., **Khrenova M.G.**, Giudetti G., Faraji S., Krylov A.I., Nemukhin A.V. Multiscale Simulations of the Covalent Inhibition of the SARS-CoV-2 Main Protease: Four Compounds and Three Reaction Mechanisms // *Journal of the American Chemical Society*, 2023, том 145, № 24, -13204-13214.
4. Boyko K.M., Matyuta I.O., Nikolaeva A.Y., Rakitina T.V., Popov V.O., Bezsudnova E.Yu, **Khrenova M.G.** A Puzzling Protein from *Variovorax paradoxus* Has a PLP Fold Type IV Transaminase Structure and Binds PLP without Catalytic Lysine // *Crystals*, 2022, том 12, № 5, -619.
5. Ilgova Ekaterina, Galkin Simon, **Khrenova Maria**, Serebryakova Marina, Gottikh Marina, Anisenko Andrey. Complex of HIV-1 Integrase with Cellular Ku Protein: Interaction Interface and Search for Inhibitors // *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, том 23, № 6, -2908.

3. Ф.И.О.: Попцова Мария Сергеевна

Ученая степень: кандидат физико-математических наук

Ученое звание: без ученого звания

Научная специальность: 03.01.02 - Биофизика

Должность: заведующий международной лабораторией биоинформатики, доцент,
Факультет компьютерных наук

Место работы: Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»

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

Тел.: +7(962)9095153

E-mail: mpoptsova@hse.ru

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

1. Beknazarov N., Konovalov D., Herbert A., **Poptsova M.** Z-DNA formation in promoters conserved between human and mouse are associated with increased transcription reinitiation rates // *Scientific Reports*, 2024, том 14, № 11, -17786.
2. Herbert A., Pavlov F., Konovalov D., **Poptsova M.** Conserved microRNAs and Flipons Shape Gene Expression during Development by Altering Promoter Conformations // *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, том 24, № 5, -4884.
3. Zhang T., Yin C., Fedorov A., Qiao L., Bao H., Beknazarov N., Wang S., Gautam A., Williams M. R., Crawford J. C., Peri S., Studitsky V., Beg A., Thomas P., Walkley C., Xu Y., **Poptsova M.**, Herbert A., Balachandran S. ADAR1 masks the cancer immunotherapeutic promise of ZBP1-driven necroptosis // *Nature*, 2022, том 606, № 7914, -594-602.
4. Cheloshkina Kseniia, Bzhikhatlov Islam, **Poptsova Maria.** Randomness in Cancer Breakpoint Prediction // *Journal of Computational Biology*, 2021, том 28, № 7, -716-731.
5. Beknazarov Nazar, Jin Seungmin, **Poptsova Maria.** Deep learning approach for predicting functional Z-DNA regions using omics data // *Scientific Reports*, 2020, том 10, № 1, -19134.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.015.10,

И.В. Шаповалова