

**Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Федуловой Анастасии Сергеевны
«Исследование механизмов динамики ДНК-гистоновых комплексов методами
молекулярного моделирования»**

1. Ф.И.О.: Коваленко Илья Борисович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: –

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

Должность: ведущий научный сотрудник

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

Адрес места работы: 119234, Россия, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 24.

Тел.: +7495 939 02 89

E-mail: [REDACTED]

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

1. Fedorov, V. A., Kholina, E. G., Gudimchuk, N. B., Kovalenko, I. B. Bacterial mini microtubule as a minimal model system for exploring dynamic instability using molecular dynamics simulations // *Supercomputing Frontiers and Innovations* — 2025 — Vol. 12 — I. 2 — P. 5–16.
2. Bozdaganyan, M., Fedorov, V., Kholina, E., Kovalenko, I., Gudimchuk, N., Orekhov, P. Exploring tubulin-paclitaxel binding modes through extensive molecular dynamics simulations // *Scientific reports* — 2025 — Vol. 15 — I. 1, 8378.
3. Kovalenko, I., Fedorov, V., Khruschev, S., Antal, T., Riznichenko, G., Rubin, A. 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 — Vol. 25 — I. 20 — 11083.
4. Kovalenko, I., Kholina, E., Fedorov, V., Khruschev, S., Vasyuchenko, E., Meerovich, G., Strakhovskaya, M. Interaction of methylene blue with severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 envelope revealed by molecular modeling // *International Journal of Molecular Sciences* — 2023 — Vol. 24 — I. 21 — P. 15909–15909.
5. Kholina, E., Kovalenko, I., Andrew, R., 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 — I. 4 — 1929.

2. Ф.И.О.: Скрынников Николай Русланович

Ученая степень: кандидат химических наук (Ph. D.)

Ученое звание: –

Научная(ые) специальность(и): 02.00.04 «Физическая химия»

Должность: руководитель лаборатории

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Лаборатории биомолекулярного ЯМР

Адрес места работы: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

Тел.: (812)363-60-00 (9448)

E-mail: n.skrynnikov@spbu.ru

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

1. Luzik D. A., Skrynnikov N. R. Iterative Modeling via Structural Diffusion (IMSD): Exploring Fold- Switching Pathways in Metamorphic Proteins Using AlphaFold2-Based Generative Diffusion Model UFConf // Proteins-Structure Function and Bioinformatics. 2025.10.1002/prot.70050.
2. Lebedenko O. O., Polovinkin M. S., Kazovskaia A. A., Skrynnikov N. R. PCANN Program for Structure- Based Prediction of Protein-Protein Binding Affinity: Comparison With Other Neural-Network Predictors // Proteins-Structure Function and Bioinformatics. 2025. Т. 93, No 9. - С. 1498-1506.
3. Lebedenko O. O., Sekhar A., Skrynnikov N. R. Order/Disorder Transitions Upon Protein Binding: A Unifying Perspective // Proteins.-2024.-Т. 92, No 12.-С. 1459-1463.
4. Lebedenko O. O., Salikov V. A., Izmailov S. A., Podkorytov I. S., Skrynnikov N. R. Using NMR diffusion data to validate MD models of disordered proteins: Test case of N-terminal tail of histone H4 // Biophysical Journal. - 2024. - Т. 123, No 1. - С. 80-100.
5. Sun W., Lebedenko O. O., Salguero N. G., Shannon M. D., Zandian M., Poirier M. G., Skrynnikov N. R., Jaroniec C. P. Conformational and Interaction Landscape of Histone H4 Tails in Nucleosomes Probed by Paramagnetic NMR Spectroscopy// Journal of the American Chemical Society.-2023. 10.1021/jacs.3c10340.

3. Ф.И.О.: Храмеева Екатерина Евгеньевна

Ученая степень: доктор биологических наук

Ученое звание: –

Научная(ые) специальность(и): 1.5.8.Математическая биология, биоинформатика

Основное место работы:

Должность: доцент

Место работы: Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», Центр Биомедицинских технологий

Адрес места работы: 121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30 стр.1

По совместительству:

Должность: младший научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук (ИППИ РАН)

Адрес места работы: 127051, г. Москва, Большой Каретный переулок, д.19 стр. 1

Тел.: +7 (495) 280 14 81

E-mail: E.Khrameeva@skoltech.ru

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

1. Plyin, A. A., Kononkova, A. D., Golova, A. V., Shloma, V. V., Olenkina, O. M., Nenasheva, V. V., Abramov, Y. A., Kotov, A. A., Maksimov, D. A., Laktionov, P. P., Pindyurin, A. V., Galitsyna, A. A., Uliyanov, S. V., Khrameeva, E. E., Gelfand, M. S., Belyakin, S. N., Razin, S. V., Shevelyov, Y. Y. Comparison of genome architecture at two stages of male germline cell differentiation in drosophila // *Nucleic Acids Research* — 2022 — Vol. 50, I. 6, ages P. 3203–3225,.
2. Zagirova D., Kononkova A., Vaulin N., Khrameeva E.. From compartments to loops: understanding the unique chromatin organization in neuronal cells // *Epigenetics & Chromatin* —2024 — Vol. 17, no. 18.
3. Pletenev, I. A., Bazarevich, M., Zagirova, D. R., Kononkova, A. D., Cherkasov, A. V., Efimova, O. I., Tiukacheva, E. A., Morozov, K. V., Uliyanov, K. A., Komkov, D., Tvorogova, A. V., Golimbet, V. E., Kondratyev, N. V., Razin, S. V., Khaitovich, P., Uliyanov, S. V., and Khrameeva, E. E. Extensive long-range polycomb interactions and weak compartmentalization are hallmarks of human neuronal 3D genome // *Nucleic Acids Research* — 2024 — Vol. 52, I. 11, P. 6234–6252.

4. Doronin, S. A., Ilyin, A. A., Kononkova, A. D., Solovyev, M. A., Olenkina, O. M., Nenasheva, V. V., Mikhaleva, E. A., Lavrov, S. A., Ivannikova, A. Y., Simonov, R. A., Fedotova, A. A., Khrameeva, E. E., Ulianov, S. V., Razin, S. V., and Shevelyov, Y. Y. Nucleoporin elys attaches peripheral chromatin to the nuclear pores in interphase nuclei // *Communications Biology* — 2024 — Vol. 7, 783.
5. Zhegalova I. V., Ulianov S. V., Galitsyna A. A., Pletenev I. A., Tsoy O. V., Luzhin A. V., Vasiluev P. A., Bulavko E. S., Ivankov D. N., Gavrilov A. A., Khrameeva E. E., Gelfand M. S., Razin S. V. Convergent pairs of highly transcribed genes restrict chromatin looping in *Dictyostelium discoideum* // *Nucleic Acids Research* — 2025 — Vol. 53, I. 2, gkaf006.

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

Подпись, печать