

**Научный руководитель** — **Артюхов Валерий Григорьевич**, доктор биологических наук, 03.01.04 — биохимия, профессор, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», кафедра биофизики и биотехнологии, заведующий

**Официальные оппоненты:**

**Шайтан Константин Вольдемарович**, доктор физико-математических наук, 03.01.02 — биофизика, профессор, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», кафедра биоинженерии биологического факультета, профессор  
e-mail: shaytan49@yandex.ru

Список основных публикаций оппонента Шайтана К.В. по теме исследования за последние 5 лет (2011–2015 годы)

1. Метод молекулярной динамики в исследовании свойств биологических объектов / К.В. Шайтан, М.Ю. Антонов, А.К. Шайтан, В.Н. Новоселецкий, М.Е. Боздаганян, М.А. Касимова // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. — 2011. — Т. 6, № 1/2. — С. 61–75.
2. Орехов Ф., Шайтан А., Шайтан К. Расчет спектральных сдвигов мутантов бактериородопсина гибридными методами квантовой механики/молекулярной механики // Биофизика. — 2012. — Т. 57, № 2. — С. 221–231.
3. Modeling of three dimensional structure of human alpha-fetoprotein complexed with diethylstilbestrol: Docking and molecular dynamics simulation study / A.A. Terentiev, N.T. Moldogazieva, O.V. Levtsova, D.M. Maximenko, D.A. Borozdenko, K.V. Shaitan // Journal of Bioinformatics and Computational Biology. — 2012. — Vol. 10, no. 2. — P. 1241012–1241024.
4. Correlation between biological activity and conformational dynamics properties of tetra- and pentapeptides derived from fetoplacental proteins / N.T. Moldogazieva, A.A. Terentiev, M.Yu Antonov, A.N. Kazimirsky, K.V. Shaitan // Biochemistry (Moscow). — 2012. — Vol. 77, no. 5. — P. 469–484.
5. Classification of rhodopsin structures by modern methods of structural bioinformatics / G. Novikov, V. Sivozhelezov, A. Shebanova, K. Shaitan // Biochemistry (Moscow). — 2012. — Vol. 77, no. 5. — P. 435–443.
6. Новиков Г., Сивожелезов В., Шайтан К. Функционально-значимая конформационная динамика водорастворимых белков // Молекулярная биология. — 2013. — Т. 47, № 1. — С. 167–180.

7. Shaitan K. Molecular structure and the dynamics of the functioning of conformationally mobile systems // Russian Journal of Physical Chemistry B. — 2014. — Vol. 8, no. 4. — P. 524–533.

8. Identification of best protein crystallization methods by molecular dynamics / M. Bozdaganyan, N. Bragazzi, E. Pechkova, K. Shaitan, C. Nicolini // Critical Reviews in Eukaryotic Gene Expression. — 2014. — Vol. 24, no. 4. — P. 311–324.

9. Shaitan K., Fedik I. A molecular dynamics simulation of structure self organization in model biomimetic polymers // Biophysics. — 2015. — Vol. 60, no. 3. — P. 335–340.

119991, Москва, Ленинские горы, МГУ 1, стр. 12

tel/fax: +7(495)939-23-74

e-mail: k.v.shaitan@molsim.org

**Евстигнеев Максим Павлович**, доктор физико-математических наук, профессор, 03.01.02 — биофизика, ФГАОУ ВО «Севастопольский государственный университет», кафедра физики, заведующий  
e-mail: max\_evstigneev@mail.ru

Список основных публикаций оппонента Евстигнеева М.П. по теме  
исследования за последние 5 лет (2011–2015 годы)

1. Kostjukov V.V., Evstigneev M.P. A revised treatment of the non-electrostatic contribution to the solvation free energy of DNA-binding ligands // Journal of Molecular Liquids. 2011. Vol. 163. № 3. P. 178–180.

2. Quantification of the interceptor action of caffeine on the in vitro biological effect of the anti-tumour agent topotecan / M.P. Evstigneev, A.A. Mosunov, V.P. Evstigneev, H.G. Parkes, D.B. Davies // European Biophysics Journal. 2011. Vol. 40. № 8. P. 969–980.

3. Parsing of the free energy of aromatic-aromatic stacking interactions in solution / V.V. Kostjukov, N.M. Khomytova, M.P. Evstigneev, A.A. Hernandez Santiago, A.-M.C. Tavera, J.S. Alvarado // The Journal of Chemical Thermodynamics. 2011. Vol. 43. № 10. P. 1424–1434.

4. Костюков В.В., Евстигнеев М.П. Энергетика комплексообразования лигандов с РНК // Биофизика. 2012. Т. 57. № 4. С. 598–613.

5. Intermolecular hydrogen bonds in hetero-complexes of biologically active aromatic molecules probed by the methods of vibrational spectroscopy / M.A. Semenov, I.N. Blyzniuk, T.V. Bolbukh, A.V. Shestopalova, M.P. Evstigneev, V.Y.

Maleev // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2012. Vol. 95. P. 224.

6. Mechanism of complexation of the phenothiazine dye methylene blue with fullerene C<sub>60</sub> / A.S. Buchelnikov, V.V. Kostyukov, M.P. Yevstigneev, Yu.I. Prylutskiy // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2013. Vol. 87. № 4. P. 662–667.

7. Development of an analytical approach to study a three-component hetero-association by means of spectrophotometry / A.S. Buchelnikov, A.F. Khrustalev, M.P. Evstigneev // Applied Spectroscopy. 2013. Vol. 67. № 1. P. 29.

8. Effect of phosphate buffer on the complexation and photochemical interaction of riboflavin and caffeine in aqueous solution: a kinetic study / M.A. Sheraz, S.H. Kazi, S. Ahmed, T. Mirza, I. Ahmad, M.P. Evstigneev // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 2014. Vol. 273. P. 17–22.

9. Проблематика энергетического анализа нековалентного связывания лигандов с нуклеиновыми кислотами: настоящее и будущее / В.В. Костюков, М.П. Евстигнеев // Биофизика. 2014. Т. 59. № 4. С. 673–677.

299053, Севастополь, ул. Университетская, 33

tel.: +7(8692)43-50-02, fax: +7(8692)24-35-90

e-mail: evstigneev@sevsu.ru

#### **Ведущая организация:**

**ФГБУН «Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН»**

119991, ГСП-1, Москва, ул. Косыгина, 4

e-mail: yufk@chph.ras.ru

<http://www.chph.ras.ru/>

Список основных публикаций ведущей организации по теме исследования за последние 5 лет (2011–2015 годы)

1. Electronic and spatial structures of water-soluble dinitrosyl iron complexes with thiol-containing ligands underlying their ability to act as nitric oxide and nitrosonium ion donors / A.F. Vanin, D.S. Burbaev // Journal of Biophysics. 2011. P. 878236.

2. Possible mechanisms of the influence of hexylresorcinol on the structure-dynamic and functional properties of lysozyme protein / Yu.F. Krupyanskiy, E.G. Abdalnasyrov, A.S. Stepanov, K.B. Tereshkina, N.G. Loiko, G.I. El'-Registan // Russian Journal of Physical Chemistry B. 2012. Vol. 6. № 2. P. 301–314.

3. Engineering tyrosine-based electron flow pathways in proteins: the case of alysia myoglobin / B.J. Reeder, D.A. Svistunenko, C.E. Cooper, M.T. Wilson // *Journal of the American Chemical Society*. 2012. Vol. 134. P. 7741.
4. Amino acid and peptide heme derivatives as new promising virucidal agents / S.A. Okorochenkova, G.A. Zheltukhina, V.A. Roginsky, N.N. Nossik, S.L. Zheltukhin, V.E. Nebolsin // *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines*. 2012. Vol. 16. № 3. P. 297–309.
5. Haptoglobin binding stabilizes hemoglobin ferryl iron and the globin radical on tyrosine  $\beta$ 145 / C.E. Cooper, M.T. Wilson, B.J. Reeder, G. Silkstone, D.A. Svistunenko, D.J. Schaer, P.W. Buehler, A.I. Alayash, L. Bulow // *Antioxidants and Redox Signaling*. 2013. Vol. 18. № 17. P. 2264–2273.
6. Влияние малых лигандов и их комплексов на свойства белка лизоцима / К.Б. Терешкина, А.С. Степанов, Д.О. Сеницын, Ю.Ф. Крупянский // *Химическая физика*. 2014. Т. 33. № 7. С. 64.
7. Фемтосекундные рентгеновские лазеры на свободных электронах: новый метод изучения нанокристаллов и одиночных макромолекул / Ю.Ф. Крупянский, Н.К. Балабаев, Т.Е. Петрова, Д.О. Сеницын, Е.В. Грызлова, К.Б. Терешкина, Э.Г. Абдулнасыров, А.С. Степанов, В.Ю. Лунин, А.Н. Грум-Гржимайло // *Химическая физика*. 2014. Т. 33. № 7. С. 7–20.