

**Научный руководитель:**

**Венер Михаил Владимирович**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева» (ФГБОУ ВО «РХТУ им. Д. И. Менделеева»)

*Ученая степень, ученое звание, должность:* доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры квантовой химии.

*Почтовый адрес:* 125047, г. Москва, ул. Миусская пл., д. 9

*Рабочий телефон:* 8- 499-978-95-84

*Адрес электронной почты:* mikhail.vener@gmail.com

**Научный консультант:**

**Попов Василий Николаевич**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования, «Воронежский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ВГУ»)

*Ученая степень, ученое звание, должность:* доктор биологических наук, профессор, заведующий кафедрой генетики, цитологии и биоинженерии.

*Почтовый адрес:* 394018, г. Воронеж, ул. Университетская площадь, д. 1

*Рабочий телефон:* +7 (473) 220-75-33

*Адрес электронной почты:* popov@vsu.ru

**Официальные оппоненты:**

**Первый оппонент: Ефремов Роман Гербертович**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук (ИБХ РАН)

*Ученая степень, ученое звание, должность:* доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией моделирования биомолекулярных систем.

*Почтовый адрес:* 117997, г. Москва, ГСП-7, ул. Миклухо-Маклая, дом 16/10

*Рабочий телефон:* +7 (495) 330-58-74

*Адрес электронной почты:* r-efremov@yandex.ru

**Список основных публикаций оппонента Ефремова Романа Гербертовича по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:**

1. Krylov N.A., Pentkovsky V.M., **Efremov R.G.** Nontrivial behavior of water in the vicinity and inside lipid bilayers as probed by molecular dynamics simulations // ACS Nano, 2013. – V. 7 (10). – P. 9428-42.
2. Volynsky P. E., Polyansky A. A., Fakhrutdinova G. N., Bocharov E. V., **Efremov R. G.** Role of dimerization efficiency of transmembrane domains in activation of fibroblast growth factor receptor 3 // J. Am. Chem. Soc. – 2013. – V.135. – P. 8105-8108.
3. Chugunov A.O., Koromyslova A.D., Berkut A.A., Peigneur S., Tytgat J., Polyansky A.A., Pentkovsky V.M., Vassilevski A.A., Grishin E.V., **Efremov R.G.** Modular Organization of  $\alpha$ -Toxins from Scorpion Venom Mirrors Domain Structure of Their Targets — Sodium Channels // J. Biol. Chem . – 2013. – V.288. – P. 19014–19027.
4. Polyansky A.A., Volynsky P.E., **Efremov R.G.** Multistate organization of transmembrane helical protein dimers governed by the host membrane // J. Am. Chem. Soc. – 2012. – V. 134. – P.14390-143400.
5. Koromyslova A.D., Chugunov A.O., **Efremov R.G.** Deciphering Fine Molecular Details of Proteins' Structure and Function with a Protein Surface

Topography (PST) Method // J. Chem. Inf. Mod. – 2014. – V. 54. – P. 1189-1199.

6. Chugunov A.O., Volynsky P.E., Krylov N.A., Boldyrev I.A., **Efremov R.G.** Liquid but Durable: Molecular Dynamics Simulations Explain the Unique Properties of Archaeal-Like // Membranes Scientific Reports. – 2014. – V.4. – P. 7462.
7. Kuznetsov A.S., Polyansky A.A., Fleck M., Volynsky P.E., **Efremov R.G.** The Adaptable Lipid Matrix Promotes Protein-Protein Association In Membranes // J. Chem. Theory & Comput. – 2015. – V.11. – P. 4415–4426.

**Второй оппонент: Абдуллатыпов Азат Вадимович**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт фундаментальных проблем биологии Российской академии наук (ИФПБ РАН)

*Ученая степень, ученое звание, должность:* кандидат биологических наук, младший научный сотрудник лаборатории биотехнологии и физиологии фототрофных организмов.

*Почтовый адрес:* 142290, Россия, Московская обл., г. Пущино, ул. Институтская, дом 2

*Рабочий телефон:* 8(4967)73-27-91

*Адрес электронной почты:* azatik888@yandex.ru

**Список основных публикаций оппонента Абдуллатыпова Азата Вадимовича по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:**

1. **Абдуллатыпов А. В.**, Кондратьев М. С., Холявка М. Г., Артюхов В. Г. Реконструкция пространственной структуры инулиназы из *Kluyveromyces*

maghianus для поиска путей регулирования ее каталитической активности.  
// Биофизика, 2016. Т. 61, №4, с. 669-676.

2. **Abdullatypov A. V.**, Tsygankov A. A., Modeling three-dimensional structure of two closely related hydrogenases // Photosynthesis Research. 2015. V. 125. P. 341-353.
3. **Абдуллатыпов А. В.**, Зорин Н. А., Цыганков А. А. Взаимодействие гидрогеназы HydSL пурпурной серной бактерии *Thiocapsa roseopersicina* BBS с метилвиологеном и положительно заряженными полипептидами. // Биохимия, 2014. Т. 79, №8, с. 1009-1014.
4. **Абдуллатыпов А. В.**, Цыганков А.А. Моделирование пространственной структуры гидрогеназы HydSL пурпурной серной бактерии *Thiocapsa roseopersicina* BBS. // Компьютерные исследования и моделирование, 2013. Т. 5, № 4, с. 737-747.

#### **Ведущая организация:**

Научно-исследовательский институт физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского ФГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова»

*Почтовый адрес:* 119992, г. Москва, Ленинские горы, д.1, строение 40

*Рабочий телефон:* +7 (495) 939-53-59

*Адрес электронной почты:* fxb@genebee.msu.ru

*Адрес официального сайта:* <http://www.belozersky.msu.ru/>

#### **Список основных публикаций сотрудников ведущей организации по теме исследования за последние 5 лет:**

1. Milanovsky G.E., Shuvalov V.A., Semenov A.Y., Cherepanov D.A. Elastic Vibrations in the Photosynthetic Bacterial Reaction Center Coupled to the

- Primary Charge Separation: Implications from Molecular Dynamics Simulations and Stochastic Langevin Approach // *J. Phys. Chem. B.* – 2015. – V. 119 (43). – P.13656-13667.
2. Shalaeva D.N., Dibrova D.V., Galperin M.Y., Mulkidjanian A.Y. Modeling of interaction between cytochrome c and the WD domains of Apaf-1: bifurcated salt bridges underlying apoptosome assembly // *Biol. Direct.* – 2015. – V.10. – P.29 (1-27).
  3. Makshakova O.N., Semenyuk P.I., Kuravsky M.L., Ermakova E.A., Zuev Y.F., Muronetz V.I. Structural basis for regulation of stability and activity in glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenases. Differential scanning calorimetry and molecular dynamics. // *J. Struct. Biol.* – 2015. – V.190 (2). – P. 224-235.
  4. Gall A., Ilioaia C., Kruger T.P.J, Novoderezhkin V.I., Robert B., Van Grondelle R. Conformational Switching in a Light-Harvesting Protein as Followed by Single-Molecule // *Spectroscopy. Biophys. J.* – 2015. – V. 108 (11). – P. 2713-2720.
  5. Sun J.L., Hao S.J., Radle M., Xu W., Shelaev I., Nadtochenko V., Shuvalov V., Semenov A., Gordon H., Van Der Est A., Golbeck J.H. Evidence that histidine forms a coordination bond to the A(0A) and A(0B) chlorophylls and a second H-bond to the A(1A) and A(1B) phylloquinones in M688H(PsaA) and M668H(PsaB) variants of *Synechocystis* sp PCC 6803 // *Biochim. Biophys. Acta-Bioenerg.* – 2014. – V.1837 (8). – P.1362-1375.
  6. Siletsky S.A., Zaspas A.A., Poole R.K., Borisov V.B. Microsecond Time-Resolved Absorption Spectroscopy Used to Study CO Compounds of Cytochrome bd from *Escherichia coli* // *PLoS One.* – 2014. – 9 (4). – P. e95617 (1-10).
  7. Kuravsky M., Barinova K., Marakhovskaya A., Eldarov M., Semenyuk P., Muronetz V., Schmalhausen E. Sperm-specific glyceraldehyde-3-phosphate

dehydrogenase is stabilized by additional proline residues and an interdomain salt bridge // *BBA-Proteins Proteomics*. – 2014. – V.1844 (10). – P. 1820-1826.

8. Michel A.M., Andreev D.E., Baranov P.V. Computational approach for calculating the probability of eukaryotic translation initiation from ribo-seq data that takes into account leaky scanning // *BMC Bioinformatics*. – 2014. – V. 15. – P. 380(1-10).

9. Nadtochenko V.A., Shelaev I.V., Mamedov M.D., Shkuropatov A.Y., Semenov A.Y., Shuvalov V.A. Primary radical ion pairs in photosystem II core complexes // *Biochem.-Moscow*. – 2014. – V. 79 (3). – P. 197-204.

10. Stroylova Y.Y., Konnova T., Zuev Y.F., Chobert J.M., Choiset Y., Haertle T., Muronetz V.I. Selective Introduction of Sulfhydryl Groups into Recombinant Proteins for Study of Protein-Protein Interactions // *Chromatographia*. – 2013. – V.76 (11). – P. 621-628.

11. Gushchin V.A., Andreev D.E., Taliansky M.E., MacFarlane S.E., Solovyev A.G., Morozov S.Y. Single amino acid substitution in the tobacco mosaic virus ORF6 protein suppresses formation of complex with eEF1A and cooperative nucleic acids binding in vitro // *Dokl. Biochem. Biophys.* – 2013. – V.448 (1). – P. 1-4.

12. Maslova A.O., Meshalkina L.E., Kochetov G.A. Computer modeling of transketolase-like protein, TKTL1, a marker of certain tumor tissues // *Biochem.-Moscow*. – 2012. – V.77 (3). – P.296-299.

13. Orekhov P.S., Shaitan K.V., Mulkidjanian A.Y. Inter- and intra-monomeric communication in the cytochrome bc(1) complex as studied by molecular dynamics simulations // *Biochim. Biophys. Acta-Bioenerg.* – 2012. – V.1817. – P. S91-S92.