

СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по кандидатской диссертации Прокофьева Игоря Игоревича «Селективность пиридинфосфорилазы холерного вибриона к природным нуклеозидам и ксенобиотикам по результатам рентгеноструктурного анализа и молекулярного моделирования биомакромолекулярных комплексов».

по специальности 01.04.18 – «Кристаллография, физика кристаллов».

Полное и сокращенное наименование организации	Институт математических проблем биологии РАН - филиал Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук" (ИМПБ РАН)
Организационно-правовая форма и ведомственная принадлежность	Федеральное государственное учреждение Федеральное агентство научных организаций
Место нахождения	Московская область, г. Пушкино, ул. проф. Виткевича, д.1, ИМПБ РАН
Почтовый адрес организации с указанием индекса	142290, Московская область, г. Пушкино, ул. проф. Виткевича, д.1
Телефон с указанием кода города	+7(4967) 318504
Адрес электронной почты	com@impb.psn.ru
Адрес официального сайта в сети «Интернет»	http://www.impb.ru
Список основных публикаций работников ведущей организации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	<ol style="list-style-type: none">1. Efficient calculation of diffracted intensities in the case of nonstationary scattering by biological macromolecules under XFEL pulses, Lunin V.Y., Petrova T.E., Lunina N.L., <i>et al.</i> // <i>Acta Crystallographica. Section D: Biological Crystallography</i>. 2015. Т. 71. С. 293-303.2. Использование связанных масок в задаче восстановления изображения изолированной частицы по данным рентгеновского рассеяния. II. Зависимость точности решения от шага дискретизации экспериментальных данных // Лунина Н.Л., Петрова Т.Е., Уржумцев и др. // <i>Математическая биология и биоинформатика</i>. 2015. Т. 10. № 2. С. 508-525.3. Новые возможности рентгеновской нанокристаллографии биологических макромолекул с использованием рентгеновских лазеров на свободных электронах // Сеницын Д.О., Лунин В.Ю., Грум-Гржимайло А.Н., и др. // <i>Химическая физика</i>. 2014. Т. 33. № 7. С. 21-28.4. Фемтосекундные рентгеновские лазеры на свободных электронах: новый метод изучения нанокристаллов и одиночных макромолекул // Крупянский Ю.Ф., Балабаев Н.К., Петрова Т.Е., и др. // <i>Химическая физика</i>. 2014. Т. 33. № 7. С. 7-20.5. Использование связанных масок в задаче восстановления изображения изолированной частицы по данным рентгеновского рассеяния // Лунина Н.Л., Петрова Т.Е. // <i>Математическая биология и биоинформатика</i>. 2014. Т. 9. № 2. С. 543-562.6. Metrics for comparison of crystallographic maps // Urzhumtsev A., Afonine P.V., Adams P.D. <i>et al.</i> // <i>Acta Crystallographica. Section D: Biological Crystallography</i>. 2014.

Т. 70. № 10. С. 2593-2606.

7. Crystallographic maps and models at low and at subatomic resolutions // Urzhumtsev A.G., Afonine P.V., Lunin V.Y. // NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology. 2013. Т. 2013. С. 221-230.
8. X-rays-induced cooperative atomic movement in a protein crystal // Petrova T., Lunin V.Y., Ginell S., Mitschler A., *et al.* // NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology. 2013. Т. 2013. С. 91-103.
9. Компьютерное моделирование дифракции импульсов рентгеновских лучей на нанокристаллах биологических макромолекул с использованием унитарной аппроксимации нестационарных факторов атомного рассеяния // Лунин В.Ю., Грум-Гржимайло А.Н., Грызлова Е.В. и др. // Математическая биология и биоинформатика. 2013. Т. 8. № 1. С. 93-118.
10. Рентгеновские лазеры на свободных электронах и новые возможности визуализации объектов нано- и микромира // Синицын Д.О., Лунин В.Ю., Грум-Гржимайло А.Н. и др. // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2013. Т. 9. № 2. С. 5-32.
11. Low-resolution structure determination of Na⁺-translocating NADH: ubiquinone oxidoreductase from *Vibrio cholerae* by ab initio phasing and electron microscopy // Lunin V.Y., Lunina N.L., Casutt M.S., *et al.* // Acta Crystallographica. Section D: Biological Crystallography. 2012. Т. 68. № 6. С. 724-731.
12. Radiation-induced disorder of a protein crystal // Petrova T., Lunin V.Y., Ginell S., *et al.* // Acta Crystallographica. Section A: Foundations of Crystallography. 2013. Т. 69. № Suppl. С. 406.
13. Detection of alternative conformations by unrestrained refinement // Sobolev O.V., Lunin V.Y. // Acta Crystallographica. Section D: Biological Crystallography. 2012. Т. 68. № 9. С. 1118-1127.
14. Использование программы кристаллографического уточнения *refmac* в процессе выявления альтернативных конформаций в биологических макромолекулах // Соболев О.В., Лунин В.Ю. // Математическая биология и биоинформатика. 2012. Т. 7. № 2. С. 692-702.
15. A noncrystallographic screw axis parallel to a twin axis can corrupt intensity statistics // Lunin V.Y. // Acta Crystallographica. Section D: Biological Crystallography. 2012. Т. 68. № 6. С. 732-734.

Руководитель ИМПБ РАН –
филиала ФИЦ "ИПМ им. М.В.Келдыша РАН"
д.ф.-м.н.



/Устинин М.Н./