

Curriculum Vitae

Alexander Kyrychenko

PERSONAL:

Age	53
Date of birth	May 10, 1972
Place of birth	Kharkov, Ukraine
Marital Status	Married, 1 child
Sex	Male
Nationality	Ukrainian
Citizenship	Citizen of Ukraine

WORK ADDRESS: Institute of Chemistry, V. N. Karazin Kharkov National University
4 Svobody sq., UA-61022 Kharkov, Ukraine
Telephone: +38-057-707-5335
E-mail: a.v.kyrychenko@karazin.ua

EDUCATION:

Ph.D. in Physical Chemistry, 1998, Kharkov State University, Kharkov, Ukraine. The title of Ph.D. thesis: *“Structure, Spectral and Fluorescence Properties, and the Structural Relaxation Dynamics of Aryl Oxazole Derivatives in the Excited State”*.
Supervisor: Dr. Andrey O. Doroshenko

Doc. Chem. Sci. in Physical Chemistry, 2017, V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkov, Ukraine. The thesis title: *“Dynamics of physico-chemical processes in electronically excited molecules, nano-dimentional and biological systems: fluorescence spectroscopy and computer modeling”*

Higher education diploma (equivalent to MSc degree), 1994. Department of Chemistry, Kharkov State University, Kharkov, Ukraine.
Specialization: Organic Chemistry

PRESENT EMPLOYMENT:

2021 - present time Senior Research Associate, Department of Organic and Bioorganic Chemistry, Institute of Functional Materials Chemistry, ISS “Institute of Single Crystals”, Kharkiv, Ukraine.

2020 - present time Head of Department of Physical-Organic Chemistry, Institute of Chemistry, V. N. Karazin Kharkov National University, Kharkiv, Ukraine.

2019 - present time Professor at School of Chemistry, Department of Organic Chemistry, V. N. Karazin Kharkov National University, Kharkiv, Ukraine.

PREVIOUS RESEARCH POSITIONS: (in reverse chronological order)

2008 – 2020. Senior Research Associate at Physical-Organic Chemistry, Institute of Chemistry, V. N. Karazin Kharkov National University, Kharkiv, Ukraine

2002-2003. Fellow of NATO Advanced Science Programme. Project Title: “*Relation between the structure of hydrogen bonded complexes and the photophysics of heteroazaaromatic compounds*”. Realization in Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Science, Warsaw, Poland.
Advisor: Prof. Dr. hab. Jacek Waluk.

1999-2002. Postdoctoral Fellow, Department of Physical Chemistry, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden. Project Title: “*Controlled Energy and Electron Transfer - New Molecules for the Development of Molecular Scale Electronics*”.
Advisor: Prof. Bo Albinsson.

1998-1999. Postdoctoral Fellow, Department of Photochemistry and Spectroscopy, Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Science, Warsaw, Poland,
Advisor: Prof. Dr. hab. Jacek Waluk.

1994-1997. Ph.D. Student at Institute for Chemistry, Kharkov State University, Kharkov, Ukraine. Supervisor: Dr. Andrey O. Doroshenko

1994. Research Fellow at Institute for Chemistry, Kharkov State University, Kharkov, Ukraine.

1989-1994. Graduate Student at Kharkov State University, Department of Chemistry, Kharkov, Ukraine,

PROFESSIONAL MEMBERSHIP:

European Photochemistry Association (EPA), since 1997.
Biophysical Society, since 2008.

Scopus profile: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603879776>

H-index = 32

Number of publications in Scopus: 113

RESEARCH INTERESTS:

Experimental photophysics of bifunctional H-bond azaaromatic compounds composed of indole, carbazole, or pyrrole chromophores (analogs of 7-azaindole). Investigations how intermolecular H-bonding determines the excited-state behavior of heteroazaaromatic compounds. A solvent-mediated double proton transfer reaction (ESDPT), occurring host/guest complexes in the electronically excited-state. The mechanisms of rapid excited-state deactivation in alcohol solutions. Conformer-sensitive fluorescence quenching.

Design, synthesis and testing of new environment-sensitive fluorescent probes. Investigation of methods of their application in biophysics and medicine. Employing of fluorescent

probes for studying of solvation dynamics in nanometer-sized microemulsions, micellar environments and liposomes, as artificial models of cell membranes.

Molecular dynamic simulations of the partitioning behavior of heteroazaaromatic probes (7-azaindole and related compounds) between a water and dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) bilayer interface. Studying of the distribution and favorable binding sites of heteroazaaromatic probes within a lipid bilayer. MD simulations of the ground and excited-state solvation dynamics of fluorescent probes in bulk alcohols and dilute mixed solvents. MD modeling of non-equilibrium solvation dynamics of an electronically excited chromophore.

Intramolecular bridge-dependent energy and electron transfer in the donor-bridge-acceptor (D-A-B) systems. Long-range superexchange through-bond and through-space (the Förster and Dexter) mechanisms of energy transfer in D-B-A systems. Conformer-dependent electronic coupling for long-range singlet-singlet and triplet-triplet energy transfer. Studying of electron transport in *oligo*-(*p*-phenylene-ethynylene)-type molecular wires.

Sterically induced conformational relaxation in the lowest electronically excited-state. Excited-state dynamics of structural transformations/rearrangements in the S_1 and T_1 states. The conformational dynamics of non-planar porphyrins in the T_1 state. Abnormally large Stokes shifted fluorescence of sterically hindered aryl-derivatives of oxazole and ozadiazole, *ortho*-analogues of POPOP.

Ab initio and DFT/TDDFT calculations of the ground- and excited-state structures of organic compounds. The excited-state reaction path CASSCF calculations.

SCIENTIFIC EXPERIENCES:

- UV-Vis electronic absorption spectroscopy in solution, solid phase and solid polymeric matrices
- Fluorescence and phosphorescence spectroscopy
- Time-resolved fluorescence spectroscopy (nanosecond single photon counting and phase-modulated methods)
- Single-molecule fluorescence correlation spectroscopy (FCS)
- Confocal fluorescence-lifetime imaging (FLIM)
- Laser technique (excimer, dye and diode lasers)
- Polarized light spectroscopy
- Magnetic circular dichroism (MCD) spectroscopy
- Pump-probe transient absorption spectroscopy
- Photochemistry
- IR spectroscopy
- Low-temperature spectroscopy (Closed-cycle helium, liquid helium and liquid nitrogen cryostats for optical spectroscopy)
- Quantum chemical calculations (Gaussian98/03/09, GAMESS, Turbomole, Mopac, HyperChem)
- Molecular dynamics simulations (Gromos96, GROMACS, NAMD)
- Molecular docking (Autodock Vina, Discovery Studio, Schrödinger Suite)

COMPUTER EXPERIENCES:

Platforms: Windows XP/Vista/MS Windows, Linux, Digital UNIX.

High performance computing: Linux clusters

Programming: C/C++, Unix shell

PUBLICATION LIST: (in reverse chronological order)

1. Onipko O. V., Stoianova V., Buravov O. V., Chebanov V. A., **Kyrychenko A.**, Gladkov E. S. Synthesis of novel derivatives of 4,6-diarylpyrimidines and dihydro-pyrimidin-4-one and *in silico* screening of their anticancer activity. ***Current Organic Synthesis***. 22 (4), 556-567 (2025).
2. **Kyrychenko A.**, Ladokhin A. S. Fluorescent probes and quenchers in studies of Protein Folding and Protein-Lipid Interactions. ***The Chemical Record***, 4 (2), Art. num. e202300232 (2024).
3. Shypov R. G., Buravov O.V., Gladkov E.S., Chepeleva L.V., **Kyrychenko A.V.** Synthesis, spectral-fluorescence properties and TD-DFT calculations of 4-cyanotryptophan and its derivatives. ***Functional Materials***. 31(3), 405-412 (2024).
4. Marchenko K.I., **Kyrychenko A.V.**, Kolos N.M. Synthesis and modification of 7-aryloxy derivatives of 4,7-dihydro-[1,2,4]triazolo-[1,5-a]-pyrimidine as potent inhibitors of sirtuin-2. ***Functional Materials***. 31(2), 260-268 (2024).
5. Yevsieieva L., Trostianko P., **Kyrychenko A.**, Ivanov V., Kovalenko S., Kalugin O. Design of non-covalent dual-acting inhibitors for proteases Mpro and PLpro of coronavirus SARS-CoV-2 through evolutionary library generation, pharmacophore profile matching, and molecular docking calculations. ***ScienceRise: Pharmaceutical Science***. 52(6), 15-26 (2024).
6. **Kyrychenko A.**, Bylov I., Geleverya A., Kovalenko S., Zhuravel I., Fetyukhin V., Langer T. Computer-aided rational design and synthesis of new potential antihypertensive agents among 1,2,3-triazole-containing nifedipine analogs. ***ScienceRise: Pharmaceutical Science***. 49(3), 4-12 (2024).
7. Lohachova K. O., **Kyrychenko A.**, Kalugin O. N. Critical assessment of popular biomolecular force fields for molecular dynamics simulations of folding and enzymatic activity of main protease of coronavirus SARS-CoV-2. ***Biophysical Chemistry*** 311, 107258 (2024).
8. Lipson V.V., Yaremenko F. G., Vakula V. M., Kovalenko S. V., **Kyrychenko A. V.**, Desenko S. M., Borysko P. O., Zozulya S. O. Discovery of novel N-acylhydrazones derivatives as potent inhibitors of Sirtuin-1. ***SynOpen***. 8(2) 100-108 (2024).
9. Lohachova K. O., Sviatenko A. S., **Kyrychenko A.**, Ivanov V. V., Langer T., Kovalenko S. M., Kalugin, O. N. Computer-aided drug design of novel Nirmatrelvir analogs inhibiting main protease of Coronavirus SARS-CoV-2. ***Journal of Applied Pharmaceutical Science***, 14(5), 232-239 (2024).
10. Prud M. V., **Kyrychenko A.**, Kalugin O. N. pH-Controllable coating of silver nanoparticles with PMMA-b-PDMAEMA oligomers: A molecular dynamics simulation study. ***The Journal of Physical Chemistry C***, 127(24), 11748–11759 (2023).
11. Yevsieieva L. V., Lohachova K. O., **Kyrychenko A.**, Kovalenko S. M., Ivanov V. V., Kalugin O. N. Main and papain-like proteases as prospective targets for pharmacological treatment of coronavirus SARS-CoV-2. ***RSC Advances***, 13(50), 35500–35524 (2023).

12. Rodnin M. V., Vasques-Montes V., **Kyrychenko A.**, Oliveira N. F. B., Kashipathy M. M., Battaile K. P., Douglas J., Lovell S., Machuqueiro M., Ladokhin A. S. Histidine protonation and conformational switching in diphtheria toxin translocation domain. *Toxins*, 15(7), Art. num. 410 (2023).
13. Chepeleva L. V., Demidov O. O., Snizhko A. D., Tarasenko D. O., Chumak A. Y., Kolomoitsev O. O., Kotliar V. M., Gladkov E. S., **Kyrychenko A.**, Roshal A. D. Binding interactions of hydrophobically-modified flavonols with β -glucosidase: Fluorescence spectroscopy and molecular modelling study. *RSC Advances*, 13(48), 34107-34121 (2023).
14. Chepeleva L. V., Tarasenko D. O., Chumak A. Y., Demidov O. O., Snizhko A. D., Kolomoitsev O. O., Kotliar V. M., Gladkov E. S., Tatarets A. L., **Kyrychenko A. V.**, Roshal A. D. 4'-Benzyloxyflavonol glucoside as fluorescent indicator for β -glucosidase activity. *Functional Materials*. 30 (4), 494-505 (2023).
15. Zahrychuk H. Y., Gladkov E. S., **Kyrychenko A. V.**, Poliovyi D. O., Zahrychuk O. M., Kucher T. V., Logoyda L. S. Structure-based rational design and virtual screening of valsartan drug analogs towards developing novel inhibitors of Angiotensin II type 1 receptor. *Biointerface Research in Applied Chemistry*, 13(5), 440 (2023).
16. Vasquez Montes V., Tyagi V., Sikorski E., **Kyrychenko A.**, Freitas J. A., Thevenin D., Tobias D. J., Ladokhin A. S. Calcium-dependent membrane interactions of tumor-targeting peptide pHLIP. *Biophysical Journal*, 122(3), Art. num. 370a (2023).
17. Ivanov V., Lohachova K., Kolesnik Y., Zakharov A., Yevsieieva L., **Kyrychenko A.**, Langer T., Kovalenko S. M., Kalugin O. M. Recent advances in computational drug discovery for therapy against coronavirus SARS-CoV-2. *ScienceRise: Pharmaceutical Science*. 46(6), 4-24 (2023).
18. Lipson V. V., Yaremenko F. G., Vakula V. M., Kovalenko S. V., **Kyrychenko A. V.**, Desenko S. M., Musatov V. I., Borysko P. O., Zozulya S. O. Imidazole derivatives as potent inhibitors of Sirtuin-1. *Functional Materials*. 30(4), 486-493 (2023).
19. Zhikol O. A., Miasnikova D. Y., Vashchenko O. V., Pinchukova N. A., Zbruyev O. I., Shishkina S. V., **Kyrychenko A.**, Chebanov V. A. Host-guest complexation of (pyridinyltriazolylthio) acetic acid with cucurbit[n]urils (n=6,7,8): Molecular calculations and thermogravimetric analysis. *Journal of Molecular Structure*, 1294(P2), Art. num. 136532 (2023).
20. Lipson V., Zhikol O., Shishkina S., Semenenko A., Kulyk K., Mateychenko P., Musatov V., Mazepa A., Vakula V., Borisov A., **Kyrychenko A.** Low molecular weight supramolecular allobetuline-, cyclohexanol-, or undecanol-appended 1,2,3-triazole-based gelators: Synthesis and molecular dynamics simulation study. *SynOpen*. 7(4) 694-702 (2023).
21. **Kyrychenko A.**, Ladokhin A. S. Membrane interactions of apoptotic inhibitor Bcl-xL: What can be learned using fluorescence spectroscopy. *BBA Advances*. 3, Art. num. 100076 (2023).
22. Rodnin M. V., **Kyrychenko A.**, Vasques-Montes V., Ladokhin A. S. Redesigning apoptotic regulator Bid for thrombin activation. *Biopolymers and Cell*, 39 (4), 257–264 (2023).
23. Vasquez-Montes V., Tyagi V., Sikorski E., **Kyrychenko A.**, Freitas J.A., Thévenin D., Tobias D.J., Ladokhin A.S., Ca^{2+} -dependent interactions between lipids and the tumor-targeting peptide pHLIP. *Protein Science*. 31, Art. num. e4385 (2022).
24. Demidov O. O., Gladkov E. S., **Kyrychenko A. V.**, Roshal A. D., Synthetic and natural flavonols as promising fluorescence probes for β -glucosidase activity screening. *Functional Materials*. 29(2), 252-262 (2022).
25. Stepaniuk D. S., Blazhynska M. M., Koverga V., Kyrychenko A., Miannay F-A., Idrissi A., Kalugin O.N. Solvatochromism of a D205 indoline dye at the interface of a small TiO_2 -

- anatase nanoparticle in acetonitrile: A combined molecular dynamics simulation and DFT calculation study. *Molecular Simulation*. 48(2), 99-107 (2022).
26. **Kyrychenko A.**, Vasquez-Montes V., Ladokhin A.S. Advantages of Quantitative Analysis of Depth-Dependent Fluorescence Quenching: Case Study of BAX. *The Journal of Membrane Biology*, 255(4-5), 461-468 (2022).
 27. Snizhko A. D., **Kyrychenko A. V.**, Gladkov E. S. Synthesis of novel derivatives of 5,6,7,8-tetrahydro-quinazolines using of α -aminoamidines and in silico screening of their biological activity. *International Journal of Molecular Science*. 23 (7), Art. no. 3781. (2022)
 28. Vasquez-Montes V., Rodnin M.V., **Kyrychenko A.**, Ladokhin A.S. Lipids modulate the BH3-independent membrane targeting and activation of BAX and Bcl-xL. *Proceedings of the National Academy of Science of U.S.A.*, 118, Art. num. e2025834118 (2021).
 29. Tyagi V., Vasquez-Montes V., Freites J. A., **Kyrychenko A.**, Tobias D. J., Ladokhin A. S. Effects of cardiolipin on the conformational dynamics of membrane-anchored Bcl-xL. *International Journal of Molecular Science*, 22, Art. num. 9388 (2021).
 30. Khodzhaieva R. S., Gladkov E. S., **Kyrychenko A.**, Roshal A. D. Progress and achievements in glycosylation of flavonoids. *Frontiers in Chemistry*. 9, Art. num. 637944 (2021).
 31. Ladokhin A. S., **Kyrychenko A.**, Rodnin M. V., Vasquez-Montes V. Conformational switching, refolding and membrane insertion of the diphtheria toxin translocation domain. In *Methods in Enzymology*, Academic Press, Vol. 649, pp. 341-370 (2021).
 32. Blazhynska M. M., **Kyrychenko A.**, Kalugin O.N. pH-Responsive coating of silver nanoparticles with poly(2-(N,N-dimethylamino)ethyl methacrylate): the role of polymer size and degree of protonation. *Journal of Physical Chemistry C*, 125, 12118–12130 (2021).
 33. Blazhynska M. M., Stepaniuk D. S., Koverga V., **Kyrychenko A.**, Idrissi A., Kalugin O. N. Structure and dynamics of TiO₂-anchored D205 dye in ionic liquids and acetonitrile. *Journal of Molecular Liquids*, 332, Art. num. 115811 (2021).
 34. Slavgorodska, M. V., Gurova Y. O., **Kyrychenko, A.** γ -Cyclodextrin as a capping agent for gold nanoparticles. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1194, Art. num. 113060 (2021).
 35. **Kyrychenko, A.**, Blazhynska, M. M., Kalugin O. N. Protonation-dependent adsorption of polyarginine onto silver nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 127(7), Art. num. 075502 (2020).
 36. Blazhynska, M. M., **Kyrychenko, A. V.**, Stepaniuk, D. S., Korsun, O. M., Kovalenko, S. M., Ivanov, V. V., Miannay, F.-A., Idrissi, A., Kalugin O. N. Recent advances in theoretical investigation of titanium dioxide nanomaterials. A review. *Kharkiv University Bulletin. Chemical Series*, 34, 6-56 (2020).
 37. Slavgorodska, M. V., **Kyrychenko, A.** Adsorption behavior of β -cyclodextrin onto gold nanoparticles. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 94, Art. num. 107483 (2020).
 38. Slavgorodska, M., **Kyrychenko, A.** Structure and dynamics of pyrene-labeled poly(acrylic acid): Molecular dynamics simulation study. *Chemistry & Chemical Technology*, 14(1), 76-80 (2020).
 39. Rodnin, M. V., Kashipathy M. M., **Kyrychenko A.**, Battaile K. P., Lovell S., Ladokhin A. S. Structure of the diphtheria toxin at acidic pH: Implications for the conformational switching of the translocation domain. *Toxins*. 12(11), Art. num. 704 (2020).
 40. Vasquez-Montes, V., **Kyrychenko A.**, Vargas-Urbe, M., Rodnin, M. V., Ladokhin A. S. Conformational switching in BCL-xL: Enabling non-canonic inhibition of apoptosis involves multiple intermediates and lipid interactions. *Cells*. 9(3), Art. num. 539 (2020)

41. **Kyrychenko A.**, Ladokhin A.S. Location of TEMPO-PC in lipid bilayers: Implications for fluorescence quenching. *J. Membr. Biol.*, 253(1), 73-77 (2020).
42. Blazhynska M. M., **Kyrychenko A. V.**, Kalugin O. N. Polarizable force field for molecular dynamics simulations of silver nanoparticles. *V. N. Karazin Kharkiv National University Bulletin. Chemical Series*, 32, 46-58 (2019).
43. Doroshenko A. O., **Kyrychenko A. V.**, Valyashko O. M., Kotlyar V. N., Svechkarev D. A. 4'-Methoxy-3-hydroxyflavone excited state intramolecular proton transfer reaction in alcoholic solutions: Intermolecular versus intramolecular hydrogen bonding effect. *Journal of Photochemistry and Photobiology A*, 383, Art. no. 111964 (2019).
44. Zhelavskiy O. S., **Kyrychenko A.** Atomistic molecular dynamics simulations of the LCST conformational transition in poly(*N*-vinylcaprolactam) in water. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 90, 51-58 (2019).
45. Slavgorodska M. V., **Kyrychenko A. V.** Binding preference of α -cyclodextrin onto gold nanoparticles. *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, 17(1), 133-144 (2019).
46. **Kyrychenko A.**, Blazhynska M. M., Slavgorodska M. V., Kalugin O. N. Stimuli-responsive adsorption of poly(acrylic acid) onto silver nanoparticles: Role of polymer chain length and degree of ionization. *Journal of Molecular Liquids*, 276, 243-254 (2019).
47. Payne W. M., Svechkarev D., **Kyrychenko A.**, Mohs, A. M. The role of hydrophobic modification on hyaluronic acid dynamics and self-assembly. *Carbohydrate Polymers*, 182, 132-141 (2018).
48. **Kyrychenko A.V.**, Ladokhin A. S. Fluorescence tools for studies of membrane protein insertion. *Biopolymers and Cell*, 34, 251-271 (2018).
49. Posokhov Y., **Kyrychenko A.** Location of fluorescent probes (2'-hydroxy derivatives of 2,5-diaryl-1,3-oxazole) in lipid membrane studied by fluorescence spectroscopy and molecular dynamics simulation. *Biophysical Chemistry*, 235, 9-18 (2018).
50. Posokhov Y. O., Kyrychenko A., Korniyenko Y. Derivatives of 2,5-diaryl-1,3-oxazole and 2,5-diaryl-1,3,4-oxadiazole as environment-sensitive fluorescent probes for studies of biological membranes. *Reviews in fluorescence 2017*, Editor C.D. Geddes, 2018, Springer International Publishing: Cham. 199-230 (2018)
51. **Kyrychenko A.**, Lim N. M., Vasquez-Montes V., Rodnin M. V., Freitas J. A., Nguyen L. P., Tobias D. J., Mobley D. L., Ladokhin A. S. Refining protein penetration into the lipid bilayer using fluorescence quenching and molecular dynamics simulations: The case of diphtheria toxin translocation domain. *Journal of Membrane Biology*, 252, 379-391 (2018).
52. Svechkarev D., **Kyrychenko A.**, Payne W. M., Mohs A. M. Probing the self-assembly dynamics and internal structure of amphiphilic hyaluronic acid conjugates by fluorescence spectroscopy and molecular dynamics simulations. *Soft Matter*, 14(23), 4762-4771 (2018).
53. Blazhynska M. M., **Kyrychenko A.**, Kalugin O. N. Molecular dynamics simulation of the size-dependent morphological stability of cubic-shape silver nanoparticles. *Molecular Simulation*, 44, 981-991 (2018).
54. Svechkarev D., **Kyrychenko A.**, Payne W. M., Mohs A. M., Development of colloiddally stable carbazole-based fluorescent nanoaggregates. *J. Photochemistry & Photobiology A*, 352, 55-64 (2018).
55. **Kyrychenko A.**, Pasko D. A., Kalugin O. N. Poly(vinyl alcohol) as a water protecting agent for silver nanoparticles: The role of polymer size and structure. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19, 8742-8756 (2017).

56. **Kyrychenko A.**, Rodnin M. V., Ghatak C., Ladokhin A. S. Computational refinement of spectroscopic FRET measurements, *Data in Brief*, 12, 213-221 (2017).
57. **Kyrychenko A.**, Rodnin M. V., Ghatak C., Ladokhin A. S. Joint refinement of FRET measurements using spectroscopic and computational tools, *Analytical Biochemistry*, 522, 1-9 (2017).
58. **Kyrychenko A.**, Posokhov Y. O., Vargas-Urbe M., Ghatak C., Rodnin M. V., Ladokhin A. S. Fluorescence Applications for Structural and Thermodynamic Studies of Membrane Protein Insertion, In *Reviews in Fluorescence 2016*, Edited by Chris D. Geddes.; Springer International Publishing AG 2017, pp 243-274 (2017).
59. **Kyrychenko A.** Using fluorescence for studies of biological membranes: A Review. *Methods and Applications in Fluorescence*, 3(4), 042003/1-19 (2015).
60. **Kyrychenko A.** NANOGOLD decorated by pHLIP peptide: comparative force field study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17, 12648-12660 (2015).
61. Vargas-Urbe M., Rodnin M. V., Öjemalm K., Holgado A., **Kyrychenko A.**, Nilsson I., Posokhov Y. O., Makhatadze G., Heijne G. von, Ladokhin A. S. Thermodynamics of Membrane Insertion and Refolding of the Diphtheria Toxin T-Domain, *Journal of Membrane Biology*, 248, 383–394 (2015).
62. **Kyrychenko A.**, Rodnin M. V., Ladokhin A. S. Calibration of Distribution Analysis of the Depth of Membrane Penetration Using Simulations and Depth-Dependent Fluorescence Quenching, *Journal of Membrane Biology*, 248, 583–594 (2015).
63. Lyapunov, A., Kirichenko, T., Kulygina, C., Zubatyuk, R., Fonari, M., Kyrychenko, A., Doroshenko, A. New Fluorenonocrownophanes Containing Azobenzene: Synthesis, Properties and Interaction with Paraquat. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry* 81, 499-508 (2015).
64. **Kyrychenko A.**, Korsun O. M., Gubin I. I., Kovalenko S. M., Kalugin O. N. Atomistic Simulations of Coating of Silver Nanoparticles with Poly(vinylpyrrolidone) Oligomers: Effect of Oligomer Chain Length. *Journal of Physical Chemistry C*. 119, 7888-7889 (2015).
65. **Kyrychenko, A.**, Vasquez-Montes, V., Ulmschneider, M. B., Ladokhin, A. S. Lipid Headgroups Modulate Membrane Insertion of pHLIP Peptide. *Biophysical Journal*, 108, 791-794 (2015).
66. **Kyrychenko A.**, Freitas A. J., He J., Tobias D. J., Wimley W. C., Ladokhin A. S. Structural Plasticity in the Topology of the Membrane-Interacting Domain of HIV-1, *Biophysical Journal*, 106, 610-620 (2014).
67. Richert S., Vazquez S. M., Grzybowski M., Gryko D. T., **Kyrychenko A.**, Vauthey E. Excited-State Dynamics of an Environment-Sensitive Push–Pull Diketopyrrolopyrrole: Major Differences between the Bulk Solution Phase and the Dodecane/Water Interface. *Journal of Physical Chemistry B*, 118, 9952–9963 (2014).
68. **Kyrychenko A.**, Herbich J., Waluk J. Studies of Photoinduced NH Tautomerism by Stationary and Time-Resolved Fluorescence Techniques, In *Tautomerism: Methods and Theories*, First Edition. Edited by Liudmil Antonov.; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.: Weinheim, pp 49-78 (2014).
69. **Kyrychenko A.**, Ladokhin A. S. Refining membrane penetration by a combination of steady-state and time-resolved depth-dependent fluorescence quenching, *Analytical Biochemistry*, 446, 19-21 (2014).
70. **Kyrychenko A.**, Ladokhin A. S. Molecular dynamics simulations of depth distribution of spin-labeled phospholipids within lipid bilayer, *Journal of Physical Chemistry B*, 117, 5875–

5885 (2013).

71. **Kyrychenko A.**, Tobias D. J., Ladokhin A. S. Validation of depth-dependent fluorescence quenching in membranes by molecular dynamics simulation of tryptophan octyl ester in POPC bilayer, *Journal of Physical Chemistry B*, 117, 4770–4778 (2013).
72. Posokhov Y. O., **Kyrychenko A.** Effect of acetone accumulation on structure and dynamics of lipid membranes studied by molecular dynamics simulations, *Computational Biology and Chemistry*, 46, 23–31 (2013).
73. Kurnikov I. V., **Kyrychenko A.**, Flores-Canales J. C., Rodnin M. V., Simakov N., Vargas-Uribe M., Posokhov Y. O., Kurnikova M., Ladokhin A. S. pH-Triggered conformational switching of the diphtheria toxin T-domain: The roles of N-terminal histidines, *Journal of Molecular Biology*, 425, 2752–2764, (2013).
74. **Kyrychenko A.**, Rodnin M. V., Posokhov Y. O., Holt A., Pucci B., Killian J. A., Ladokhin A. S. Thermodynamic measurements of bilayer insertion of a single transmembrane helix chaperoned by fluorinated surfactants, *Journal of Molecular Biology*, 402, 1–7 (2012).
75. **Kyrychenko A.**, Karpushina G. V., Svechkarev D., Kolodezny D., Bogatyrenko S. I., Kryshstal A. P., Doroshenko A. O. Fluorescence probing of thiol-functionalized gold nanoparticles: Is alkylthiol coating of a nanoparticle as hydrophobic as expected? *Journal of Physical Chemistry C*, 116, 21059–21068 (2012).
76. **Kyrychenko A.**, Rodnin M.V., Vargas-Uribe M., Sharma S. K., Durand G., Pucci B., Popot J.-L., Ladokhin A. S. Folding of diphtheria toxin T-domain in the presence of amphipols and fluorinated surfactants: Toward thermodynamic measurements of membrane protein folding. *Biochimica et Biophysica Acta*, 1818, 1006–1012 (2012).
77. Rodnin M.V., **Kyrychenko A.**, Kienker P., Sharma O., Vargas-Uribe M., Collier R. J., Finkelstein A., Ladokhin A. S. Replacement of C-terminal histidines uncouples membrane insertion and translocation in diphtheria toxin T-domain. *Biophysical Journal*, 101, L41–L43 (2011).
78. **Kyrychenko A.**, Karpushina G. V., Bogatyrenko S. I., Kryshstal A. P., Doroshenko A. O. Preparation, structure, and a coarse-grained molecular dynamics model for dodecanethiol-stabilized gold nanoparticles. *Computational and Theoretical Chemistry*, 977, 34–39 (2011)
79. **Kyrychenko A.**, Sevriukov I. Yu., Syzova Z. A., Ladokhin A. S., Doroshenko A. O. Partitioning of 2,6-bis(1*H*-benzimidazol-2-yl)pyridine fluorophore into a phospholipid bilayer: Complementary use of fluorescence quenching studies and molecular dynamics simulations. *Biophysical Chemistry*, 154(1), 8-17 (2011).
80. Muretta J. M., **Kyrychenko A.**, Ladokhin A. S., Kast D. J., Gillispie G. D., Thomas D. D. High-performance time-resolved fluorescence by direct waveform recording, *Review of Scientific Instruments*, 81, 103101-1/103101-8 (2010).
81. **Kyrychenko A.**, Wu F., Thummel R. T., Waluk J., Ladokhin A. S. Partitioning and localization of environment-sensitive 2-(2'-pyridyl)- and 2-(2'-pyrimidyl)-indoles in lipid membranes: A joint refinement using fluorescence measurements and molecular dynamics simulations, *Journal of Physical Chemistry B*, 114, 13574–13584 (2010).
82. Posokhov Y. O., **Kyrychenko A.**, Ladokhin A. S. Steady-state and time-resolved fluorescence quenching with transition metal ions as short-distance probes for protein conformation, *Analytical Biochemistry*, 407(2) 284-286 (2010).
83. **Kyrychenko, A.**, Waluk, J. From the gas phase to a lipid membrane environment: DFT and MD simulations of structure and dynamics of hydrogen-bonded solvates of bifunctional heteroazaaromatic compounds. In *Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics*; Kinetics and Dynamics: from Nano- to Bio-Scale; Paneth, P., Dybala-Defratyka, A.,

Eds.; **Springer Science+Business Media B.V.**: New York, vol. 12, pp 35-75 (2010).

84. Rodnin M. V, Kyrychenko A., Kienker P., Sharma O., Posokhov Y. O., Collier R. J., Finkelstein A., Ladokhin A. S., Conformational switching of the diphtheria toxin T domain, *Journal of Molecular Biology*, 402, 1–7 (2010).
85. Kyrychenko A. A molecular dynamics model of rhodamine-labeled phospholipid incorporated into a lipid bilayer, *Chemical Physics Letters*, 485, 95–99 (2010).
86. Kyrychenko A., Posokhov Y. O., Rodnin M. V., Ladokhin A. S. Kinetic intermediate reveals staggered pH-dependent transitions along the membrane insertion pathway of the diphtheria toxin T-domain, *Biochemistry*, 48, 7584–7594 (2009).
87. Kyrychenko A., Waluk J. Distribution and favorable binding sites of pyrroloquinolines and its analogues in a lipid bilayer studied by molecular dynamics simulations. *Biophysical Chemistry*, 136(2-3), 128-135 (2008).
88. Kyrychenko A., Dyubko T. S. Molecular dynamics simulations of microstructure and mixing dynamics of cryoprotective solvents in water and in the presence of a lipid membrane. *Biophysical Chemistry*, 136(1), 23-31 (2008).
89. Rodnin M. V., Posokhov Y. O., Contino-Pépin C., Brettmann J., Kyrychenko A., Palchevskyy S. S., Pucci B., Ladokhin A. S. Interactions of fluorinated surfactants with diphtheria toxin T-domain: Testing new media for studies of membrane proteins. *Biophysical Journal*, 94, 4348–4357 (2008).
90. Nosenko Y., Kunitski M., Riehn C., Thummel R. P., Kyrychenko A., Herbich J., Waluk J., Brutschy B. Separation of different hydrogen-bonded clusters by femtosecond UV-ionization-detected infrared spectroscopy: 1*H*-pyrrolo[3,2-*h*]quinoline:(H₂O)_{n=1,2} complexes. *Journal of Physical Chemistry A*, 112(6), 1150-1156 (2008).
91. Kyrychenko A., Gawinkowski S., Urbńska N., Pietraszkiewicz M., Waluk J. Matrix isolation spectroscopy and molecular dynamics simulations for 2,7,12,17-tetra-*tert*-butylporphycene in argon and xenon. *Journal of Chemical Physics*, 127 (13), 134501-1/134501-12 (2007).
92. Nosenko Y., Kyrychenko A., Thummel R. P., Waluk J., Brutschy B., Herbich J. Fluorescence quenching in cyclic hydrogen-bonded complexes of 1*H*-pyrrolo[3,2-*h*]quinoline with methanol: Cluster size effect. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9, 3276-3285 (2007).
93. Nosenko Y., Kunitski M., Thummel R. P., **Kyrychenko A.**, Herbich J., Waluk J., Riehn C., Brutschy B. Detection and structural characterization of clusters with ultrashort-lived electronically excited states: IR absorption detected by femtosecond. *Journal of the American Chemical Society*, 128 (31), 10000-10001 (2006).
94. **Kyrychenko A.**, Waluk J. Excited-state proton transfer through water bridges and structure of hydrogen-bonded complexes in 1*H*-pyrrolo[3,2-*h*]quinoline: Adiabatic time-dependent density functional theory study. *Journal of Physical Chemistry A*, 110 (43), 11958-11967 (2006).
95. Pettersson K., Kyrychenko A., Rönnow E., Ljungdahl T., Mårtensson J., Albinsson B. Singlet energy transfer in porphyrin-based donor-bridge-acceptor systems: Interaction between bridge length and bridge energy. *Journal of Physical Chemistry A*, 110 (1), 310-318 (2006).
96. Lvovska M. I., Roshal A. D., Doroshenko A. O., Kyrychenko A. V., Khilya V. P. Fluorescence behavior of chromones containing several protolytic centers. 3-Thiazolylchromones: Emission band assignment and pH dependent effects *Spectrochimica Acta A*, 65, 397-405 (2006).
97. Kyrychenko A., Waluk J. Molecular dynamics simulations of matrix deposition. III. Site structure analysis for porphycene in argon and xenon. *Journal of Chemical Physics*, 123 (6),

064706-1/064706-10 (2005).

98. Lvovska M. I., Roshal A. D., Doroshenko A. O., Kyrychenko A. V., Khilya V. P. Fluorescence behavior of isoflavones: pH-Dependent effects. **Functional Materials**, 12 (3), 563-568 (2005).
99. Kyrychenko A., Gorski A., Waluk J. Molecular dynamics and DFT simulations of matrix deposition. II. Absolute site structure assignment for porphyrin in xenon. **Journal of Chemical Physics**, 121 (23), 12017-12025 (2004).
100. Kyrychenko A., Waluk J. Molecular dynamics simulations of matrix deposition. I. Site structure analysis for porphyrin in argon and xenon. **Journal of Chemical Physics**, 119 (14), 7318-7327 (2003).
101. Szydłowska I., Kyrychenko A., Gorski A., Waluk J., Herbich J. Excited states of 4-dimethylaminopyridines: Magnetic circular dichroism and computational studies. **Photochemical and Photobiological Sciences**, 2(3), 187-194 (2003).
102. Szydłowska I., Kyrychenko A., Nowacki J., Herbich J. Photoinduced intramolecular electron transfer in 4-dimethylaminopyridines. **Physical Chemistry Chemical Physics**, 5 (6), 1032-1038 (2003).
103. Kyrychenko A., Andreasson J., Mårtensson J., Albinsson B. Sterically induced conformational relaxation and structure of *meso*-diaryloctaalkyl porphyrins in the excited triplet state: Experimental and DFT studies. **Journal of Physical Chemistry B**, 106 (48), 12613-12622 (2002).
104. Kyrychenko A., Albinsson B. Conformer-dependent electronic coupling for long-range triplet energy transfer in donor-bridge-acceptor porphyrin dimers. **Chemical Physics Letters**, 366 (3-4), 291-299 (2002).
105. Andreasson J., Kyrychenko A., Mårtensson J., Albinsson B. Temperature and viscosity dependence of the triplet energy transfer process in porphyrin dimers. **Photochemical and Photobiological Sciences**, 1 (2), 111-119 (2002).
106. Doroshenko A.O., Sakhno T.V., Kyrychenko A.V. Molecular structure and photophysics of N-quaternary diaryloxazolium salts. **Spectroscopy Letters**, 35 (2), 171-181 (2002).
107. Kyrychenko A., Stepanenko Y., Waluk J. Molecular dynamics and DFT studies of intermolecular hydrogen bonds between bifunctional heteroazaaromatic molecules and hydroxylic solvents. **Journal of Physical Chemistry A**, 104 (42): 9542-9555 (2000).
108. Kyrychenko A., Herbich J., Wu F., Thummel R.P., Waluk J. Solvent-induced *syn-anti* rotamerization of 2-(2'-pyridyl)indole and the structure of its alcohol complexes, **J. of the American Chemical Society**, 122 (12), 2818-2827 (2000).
109. Doroshenko A.O., Kyrychenko A.V., Baumer V.N., Verezubova A.A., Ptyagina L.M. Molecular structure, fluorescent properties and dynamics of excited state structural relaxation of the oxadiazolic *ortho*-analog of POPOP with the additional sterical hindrance. **Journal of Molecular Structure**, 524, 289-296 (2000).
110. Doroshenko A.O., Kyrychenko A.V., Waluk J. Low temperature spectra of the *ortho*-POPOP molecule: Additional arguments of its flattening in the excited state. **Journal of Fluorescence**, 10 (1), 41-48 (2000).
111. Kyrychenko A., Herbich J., Izydorzak M., Gil M., Dobkowski J., Wu F.Y., Thummel R.P., Waluk J. Photoinduced double proton transfer: Inter- and intramolecular cases. **Israel Journal of Chemistry**, 39 (3-4), 309-318 (1999).
112. Kyrychenko A., Herbich J., Izydorzak M., Wu F., Thummel R.P., Waluk J. Role of ground state structure in photoinduced tautomerization in bifunctional proton donor-acceptor

molecules: 1H-pyrrolo[3,2-h]quinoline and related compounds. **Journal of the American Chemical Society**, 121 (48), 11179-11188 (1999).

113. Kyrychenko A.V., Doroshenko A.O., Shershukov V.M. Spectral-fluorescent properties and dynamics of excited state structural relaxation of 1,2-bis-(5-phenyloxazolyl-2)-benzene derivatives. **Chem. Phys. Reports**, 17(9), 1643-1651 (1998).
114. Doroshenko A.O., Baumer V.N., Kyrychenko A.V., Shershukov V.M., Tolmachev A.V. The peculiarities of molecular structure of un-symmetric *ortho*-analogs of POPOP. **Chemistry of Heterocyclic Compounds**, 11, 1549-1558 (1997) (in Russian).
115. Doroshenko A.O., Kyrychenko A.V., Mitina V.G., Ponomarev O.A. Spectral properties and dynamics of the excited state structural relaxation of the *ortho*-analogs of POPOP - effective abnormally large Stokes shift luminophores. **Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chem.**, 94(1), 15-26 (1996).
116. Baumer V.N., Doroshenko A.O., Verezubova A.A., Ptyagina L.M., Kyrychenko A.V., Ponomarev O.A. The molecular structure and conformations of the sterically hindered aryl derivative of 1,3,4-oxadiazole, containing o,o'-biphenyl nucleus. **Chemistry of Heterocyclic Compounds**, 7, 984-991 (1996) (in Russian).
117. Doroshenko A.O., Patsenker L.D., Baumer V.N., Chepeleva L.V., Vankevich A.V., Kyrychenko A.V., Yarmolenko S.N., Scherschukov V.M., Mitina V.G., Ponomarev O.A. Structure of sterically hindered aryl derivatives of five-membered nitrogen containing heterocyclic *ortho*-analogs of POPOP. **Molecular Engineering**, 3, 353-363 (1994).

CONFERENCES: (in reverse chronological order)

1. L. V. Yevsieiva, S. M. Kovalenko, A. V. Kyrychenko, V. V. Ivanov, O. N. Kalugin. Screening algorithm for discovery of novel dual-acting non-covalent inhibitors for Mpro and PLpro proteases of SARS-CoV-2 coronavirus. Міжнародна науково-практична конференція «Експериментальна та клінічна фармакологія». 23–24 жовтня 2024 р., Харків, НФаУ : Матеріали конференції, 2024, с. 79-80.
2. D. Miasnikova, A. Kyrychenko, N. Pinchukova, O. Vashchenko, P. Mateychenko, V. Chebanov. Theoretical and experimental study of the supramolecular complexes of cucurbit[n]urils with triazolyl thioacetic acid derivatives) IIIrd International Research and Practice Conference «Nanoobjects & Nanostructuring» (N&N–2024). October 7–10, 2024, Lviv, Ukraine : Conference Proceedings, 2024, с.7-8.
3. В. В. Ліпсон, В. М. Вакула, О. В. Циганков, О. П. Безугла, А. М. Ляпунова, І. О. Зінченко, Н. О. Пінчукова, О. В. Кириченко, М. Г. Широбокова, С. Г. Маланчук, М. М. Мішина, В. О. Верещак, Д. Ю. Мяснікова. Похідні 3,3'-бісіндолілметану - потужні агенти у боротьбі з бактеріальною резистентністю. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, Д-28.
4. A.V. Kyrychenko, K. O. Lohachova, V.V. Ivanov, S.M. Kovalenko, O.N. Kalugin. Generation and screening of evolutionary libraries as a promising strategy for drug discovery against coronavirus SARS-CoV-2. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, Д-30.
5. Є.С. Гладков, А.Д. Сніжко, О.В. Бураков, В.А. Чебанов, О.В. Кириченко. Використання α -аміноамідинів у синтезі нових біологічно активних гетероциклічних сполук. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, Д-77.
6. Д.Ю. Мяснікова, Н.О. Пінчукова, О.В. Кириченко, О.В. Циганков, В.М. Вакула, В.В. Ліпсон, О.В. Ващенко, П.В. Матейченко, В.А. Чебанов. Супрамолекулярні комплекси на основі похідних дііндолілметану з циклодекстринами та кукурбіт[6]урилом. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, С-37.
7. В. Коржовська, Ю. Матяшук, О. Загричук, Є. Гладков, О. Кириченко, Г. Загричук. Синтез та дослідження *in silico* окремих представників халконів, флавонолів і їх 3-о-заміщених похідних. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, С-80.
8. А.Д. Сніжко, Л.В. Чепелєва, Є.С. Гладков, О.Д. Рошаль, О.В. Кириченко. Нові флуоресцентні зонди на основі гідрофобно-модифікованих похідних флавонолу. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, 3-30.
9. І.О. Журавель, А.О. Гелеверя, І.Є. Білов, С.М. Коваленко, О.В. Кириченко. Пошук нових речовин антигіпертензивної дії в ряду несиметричних 1,2,3-триазол-4-іл-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів. XXVI Українська конференція з органічної хімії та біоорганічної хімії. 16-20 вересня 2024 року, Ужгород. Ужгородський національний університет : Матеріали конференції, 2024, 3-62.

10. Д.Ю. Мяснікова, Н.О. Пінчукова, О.В. Кириченко, О.В. Циганков, В.М. Вакула, В.В. Ліпсон, В.А. Чебанов. Супрамолекулярні системи на основі циклодекстринів та похідних дііндолілметану. VIII Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: Дослідження та перспективи». м. Житомир, 1 травня 2024 р., Житомирський державний університет імені Івана Франка : Матеріали конференції, 2024, с. 221-222.
11. D. O. Anokhin, A. B. Zakharov, V. V. Ivanov, S. M. Kovalenko, A. V. Kyrychenko, O. N. Kalugin. A combination of L_1 -regularized logistic regression and pharmacophore screening/docking in drug discovery against COVID-19 disease. Всеукраїнська науково-практична конференція з міжнародною участю «Сучасна фармація: реалії сьогодення та перспективи розвитку». 9–12 квітня 2024 р., Одеса, Одеський національний університет імені І.І. Мечникова: Тези доповідей 2024, с. 66-69.
12. A. V. Kyrychenko, A. O. Geleverya, L. V. Yevsieiva, S. M. Kovalenko, O. N. Kalugin. Anti-COVID-19 drug discovery and de novo molecular generation of evolutionary libraries of non-covalent inhibitors of main protease of coronavirus SARS-COV-2. Всеукраїнська науково-практична конференція з міжнародною участю «Сучасна фармація: реалії сьогодення та перспективи розвитку». 9–12 квітня 2024 р., Одеса, Одеський національний університет імені І.І. Мечникова: Тези доповідей 2024, с. 79-80.
13. S. Kovalenko A. Kyrychenko, V. Lipson, S. Desenko. COVID-19 therapeutics by inhibiting SARS-COV-2 spike RBD and human ACE2 interaction with N-acylhydrazones: molecular docking study. Всеукраїнська науково-практична конференція з міжнародною участю «Сучасна фармація: реалії сьогодення та перспективи розвитку». 9–12 квітня 2024 р., Одеса, Одеський національний університет імені І.І. Мечникова: Тези доповідей 2024, с. 97-99.
14. І. О. Журавель, А. О. Гелеверя, С. М. Коваленко, І. Є. Білов, О. В. Кириченко. Синтез нових несиметричних 1,2,3-триазол-4-іл-2,6-диметил-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів, перспективних як блокатори каналів кальцію L-типу. Всеукраїнська науково-практична конференція з міжнародною участю «Сучасна фармація: реалії сьогодення та перспективи розвитку». 9–12 квітня 2024 р., Одеса, Одеський національний університет імені І.І. Мечникова: Тези доповідей 2024, с. 141-143.
15. Р.Г. Шипов, Є.С. Гладков, Л.В. Чепелева, О.В. Кириченко. Синтез та спектрально-флуоресцентні властивості неприродних амінокислот аналогів триптофану. XVI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2024", Тези доповідей: 30 квітня 2024 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2024. р. 108-109.
16. А.Д. Сніжко, Л.В. Чепелева, Є.С. Гладков, О.Д. Рошаль, О.В. Кириченко. Синтез та спектрально-флуоресцентні властивості нових гідрофобно-модифікованих похідних 3-гідроксифлавоу. XVI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2024", Тези доповідей: 30 квітня 2024 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2024. р. 101-102.
17. M.V. Prud, M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Computer-aided design of hybrid organic-inorganic nanomaterials. XVI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2024", Тези доповідей: 30 квітня 2024 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2024. р. 21-22.
18. К.О. Lohachova, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Force field benchmarking of molecular dynamics simulations of main protease of coronavirus SARS-CoV-2. XVI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2024", Тези доповідей: 30 квітня 2024 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2024. р. 19-20.

19. Д.О. Анохін, О.М. Калугін, С.М. Коваленко, О.В. Кіріченко, А.Б. Захаров, В.В. Іванов. Застосування фармакофорного скринінгу, молекулярного докінгу та QSAR-методів для пошуку антикоронавірусних препаратів. XI Міжнародна науково-практична інтернет-конференція здобувачів вищої освіти та молодих учених «Хімія і сучасні технології». 06-07 грудня 2023 р., у 6-и томах. Т. II., м. Дніпро, ДВНЗ УДХТУ: Тези доповідей, 2023, с. 32-33.
20. А.О. Гелеверя, І.О. Журавель, С.М. Коваленко, О.В. Кириченко, І.Є. Білов. Синтез нових похідних 1,2,3-триазол-4-іл-1,4-дигідропіридину та дослідження їх впливу на канали кальцію L-типу методом молекулярного докінгу. XI Міжнародна науково-практична інтернет-конференція здобувачів вищої освіти та молодих учених «Хімія і сучасні технології». 06-07 грудня 2023 р., у 6-и томах. Т. II., м. Дніпро, ДВНЗ УДХТУ: Тези доповідей, 2023, с. 38-39.
21. A. Geleverya, S. Kovalenko, A. Kyrychenko, I. Bylov, I. Zhuravel. Development of new potential antihypertensive drugs from hybrid molecules with 1,4-dihydropyridine or pyridine and 1,2,3-triazole moieties. XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. 10-12 жовтня 2023 р., м. Харків, Друкарник: Збірка праць, 2023, с. 7.
22. Д.О. Анохін, О.М. Калугін, С.М. Коваленко, О.В. Кіріченко, А.Б. Захаров, В.В. Іванов. Пошук активних молекул проти коронавірусної хвороби. Скринінг на основі фармакофорного аналізу, докінг, їх взаємозв'язок. XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. 10-12 жовтня 2023 р., м. Харків, Друкарник: Збірка праць, 2023, с. 16.
23. А.Д. Сніжко, Л.В. Чепелева, Є.С. Гладков, О.Д. Рошаль, О.В. Кириченко. Синтез та дослідження фізико-хімічних властивостей нових гідрофобно-модифікованих похідних флавонолу. XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. 10-12 жовтня 2023 р., м. Харків, Друкарник: Збірка праць, 2023, с. 20.
24. К.О. Логачова, Л.В. Євсєєва, Я.В. Колесник, А.Б. Захаров, О.В. Кириченко, В.В. Іванов, С.М. Коваленко, О.М. Калугін. Молекулярний дизайн та скринінг нових інгібіторів подвійної дії папаїно-подібної та головної протеази коронавірусу SARS-CoV-2. XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. 10-12 жовтня 2023 р., м. Харків, Друкарник: Збірка праць, 2023, с. 25.
25. Д.Ю. Мяснікова, О.В. Кириченко, Н.О. Пінчукова, О.В. Ващенко, О.І. Збруєв, В.А. Чебанов. Вивчення комплексоутворення кукурбіт[*n*]урилів (*n*=6,7,8) з 5-піридиніл-1,2,4-триазол-3-ілтіооцтовою кислотою. XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. м. Харків, 10-12 жовтня 2023 р., Друкарник: Збірка праць, 2023, с. 38.
26. М.В. Прудь, О.В. Кириченко, О. Приймак, М. Еппле, О.М. Калугін. Молекулярно-динамічне моделювання глутатіон-функціоналізованих наночастинок золота. XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. м. Харків, 10-12 жовтня 2023 р., Друкарник: Збірка праць, 2023, с. 46.
27. V. Vasquez Montes, V. Tyagi, E. Sikorski, A. Kyrychenko, J. A. Freitas, D. Thevenin, D. J. Tobias, A.S. Ladokhin. Calcium-dependent membrane interactions of tumor-targeting peptide pHLP. The Biophysical Society 67th Annual Meeting, 18–22 February 2023, San Diego, California, U.S.A. 1801-Pos.
28. K. Lohachova, V. Ivanov, D. Anokhin, A. Zakharov, L. Yevsieieva, A. Kyrychenko, T. Langer, S. Kovalenko, O. Kalugin. Rational design of novel inhibitors of SARS-CoV-2 main protease. International Scientific Internet Conference: «Molecular Engineering and Computational Modelling for Nano- and Biotechnology: From Nanoelectronics to

- Biopolymers», September 27–28, 2023, Cherkasy, Ukraine. Book of Abstracts. Cherkasy: Chabanenko Yu. A., **2023**. P. 35-36.
29. D. Miasnikova, O. Zhikol, A. Kyrychenko, N. Pinchukova, O. Vashchenko, O. Zbruyev, V. Chebanov. Molecular calculations of host-guest complexation of (pyridinyltriazolylthio) acetic acid with cucurbit[n]urils (n=6,7,8). International Scientific Internet Conference: «Molecular Engineering and Computational Modelling for Nano- and Biotechnology: From Nanoelectronics to Biopolymers», September 27–28, 2023, Cherkasy, Ukraine. Book of Abstracts. Cherkasy: Chabanenko Yu. A., **2023**. P. 37-38.
 30. A. Kyrychenko, A. Ladokhin. Membrane-induced conformational switching and activation of Apoptotic inhibitor Bcl-xL. 14th European Biophysics Congress, 31st July - 4th August 2023, Stockholm, Sweden, **2023**. P-199.
 31. S.M. Kovalenko, L.V. Yevsieieva, K.O. Lohachova, Y.V. Kolesnik, A.B. Zakharov, A.V. Kyrychenko, V.V. Ivanov, O. N. Kalugin. Validation of pharmacophore models in virtual screening of biologically active molecules. Науково-практична Інтернет-конференція з міжнародною участю «Topical issues of clinical pharmacology and clinical pharmacy», 25-26 жовтня 2023 року, Харків: НФаУ, **2023**. с. 198-200.
 32. S. Kovalenko, V. Lipson, A. Kyrychenko, S. Desenko. Molecular docking of inhibiting decapeptides against spike receptor binding domain of coronavirus SARS-CoV-2. IV Міжнародна наукова конференція «Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології», 7-9 грудня 2023 року, Луцьк: Вежа-Друк, **2023**. с. 259-260.
 33. M.V. Prud, M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Adsorption of poly(acrylic acid) onto amorphous TiO₂ nanoparticle: a molecular dynamics simulation study. Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface”. Book of Abstracts. 11-12 October 2023, Kyiv, Ukraine. **2023**. P. 131.
 34. L.V. Chepeleva, O.O. Demidov, A.D. Snizhko, D.O. Tarasenko, A.Y. Chumak, O.O. Kolomoitsev, V.M. Kotlyar, E.S. Gladkov, A.V. Kyrychenko, A.D. Roshal. Binding interaction of hydrophobically-modified flavonols with β -glucosidase: fluorescence spectroscopy and molecular docking study. Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface”. Book of Abstracts. 11-12 October 2023, Kyiv, Ukraine. **2023**. P. 38.
 35. O.N. Kalugin, M.M. Blazhynska, D.S. Stepaniuk, V.A. Koverga, A.V. Kyrychenko, V.V. Ivanov, F.-A. Miannay, A. Idrissi. D205 dye at the TiO₂/ionic and molecular liquids interface: a molecular modelling study. Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface”. Book of Abstracts. 11-12 October 2023, Kyiv, Ukraine. **2023**. P. 71.
 36. M. Prud, A. Kyrychenko, O. Prymak, M. Epple, O. Kalugin. pH-Dependent structure of glutathione-functionalized small gold nanoparticles: molecular dynamics simulation study. XV Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2023", Тези доповідей: 24-26 квітня 2023 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, **2023**. р. 156-157.
 37. D.O. Anokhin, A.V. Kyrychenko, S.M. Kovalenko, O.N. Kalugin, T. Langer, V.V. Ivanov. Toward *in silico* approach for finding molecules with anti Covid-19 activity: pharmacophore virtual screening vs. docking. Міжнародна Інтернет Конференція "Modern chemistry of medicines", Тези доповідей: 18 травня 2023 р. Харків: НФаУ, **2023**. р. 6-7.
 38. K.O. Lohachova, A.V. Kyrychenko, V.V. Ivanov, T. Langer, S.M. Kovalenko, O.N. Kalugin. Rational design of novel nirmatrelvir analogs inhibiting main protease of coronavirus SARS-CoV-2. Міжнародна Інтернет Конференція "Modern chemistry of medicines", Тези доповідей: 18 травня 2023 р. Харків: НФаУ, **2023**. р. 48-49.

39. І.О. Журавель, А.О. Гелеверя, С.М. Коваленко, О.В. Кириченко, І.Є. Билов, Д.О. Лега, Т.В. Шпичак. Пошук нових блокаторів каналів кальцію *L*-типу серед похідних 1,2,3-триазол-4-іл-піридину. Міжнародна Internet Конференція "Modern chemistry of medicines", Тези доповідей: 18 травня 2023 р. Харків: НФаУ, **2023**. р. 156.
40. Д. Мяснікова, Н. Пінчукова, О. Жикол, О. Кириченко, О. Збруєв, О. Ващенко, В. Чебанов. Вивчення комплексоутворення кукурбіт[6]урилу з похідними 1,2,4-триазол-3-ілтіооцтовою кислоти та їх солями. XIX наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2023", Збірка тез: 29-31 травень 2023, Львів, **2023**, У21.
41. А. Сніжко, Є. Гладков, О. Рошаль, О. Кириченко. Синтез та дослідження фізико-хімічних властивостей похідних 3-гідрокси-4Н-хромен-4-ОН-2-алкоксикарбонових кислот. XIX наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2023", Збірка тез: 29-31 травень 2023, Львів, **2023**, О18.
42. Р. Шипов, Л. Логойда, Г. Загричук, Д. Польовий, Є. Гладков, О. Кириченко. Дослідження взаємодії валсартану та його похідних з β -циклодекстрином методом молекулярного докінгу. XIX наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2023", Збірка тез: 29-31 травень 2023, Львів, **2023**, О13.
43. M. Prud, A. Kyrychenko, O. Prymak, M. Epple, O. Kalugin. Molecular dynamics simulations of glutathione-functionalized small gold nanoparticles. XIX наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2023", Збірка тез: 29-31 травень 2023, Львів, **2023**, Ф5.
44. В. Коржовська, Ю. Матящук, Є. Гладков, О. Кириченко, Г. Загричук. Синтез 4'-заміщених флавонолів, продуктів їх 3-*O*-алкілювання та прогнозування потенційної біологічної активності методом молекулярного докінгу. XIX наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2023", Збірка тез: 29-31 травень 2023, Львів, **2023**, О41.
45. А.Д. Сніжко, Є.С. Гладков, О.В. Кириченко. Синтез нових похідних 5,6,7,8-тетрагідрокіназоліну з використанням α -аміноамідинів та *in silico* скринінг їх біологічної активності. V International (XV Ukrainian) Scientific Conference for Students and Young Scientists "Current Chemical Problem", Book of Abstracts: March 22-24 2022, Vinnytsia, Ukraine, **2022**, p. 69.
46. В.С. Стоянова, О.В. Кириченко, Є.С. Гладков. Синтез та властивості похідних 2-(4,6-дифенілпіримідин-2-іл)пропан-2-аміну як потенційно біологічних активних сполук. V International (XV Ukrainian) Scientific Conference for Students and Young Scientists "Current Chemical Problem", Book of Abstracts: March 22-24 2022, Vinnytsia, Ukraine, **2022**, p. 71.
47. R.H. Shypov, E.S. Gladkov, A.V. Kyrychenko. Inclusion complexes of flavonols with β - and γ -cyclodextrins: A molecular docking study. V International (XV Ukrainian) Scientific Conference for Students and Young Scientists "Current Chemical Problem", Book of Abstracts: March 22-24 2022, Vinnytsia, Ukraine, **2022**, p. 76.
48. K.O. Lohachova, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Inhibitory effect of sharp-edged gold nanoparticles against main protease of coronavirus SARS-CoV-2. Ukrainian Conference with International Participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface". Book of Abstracts. 19-20 October 2022, Kyiv, Ukraine. **2022**. p. 112.
49. M.V. Prud, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. pH-controlled coating of silver nanoparticles with PMMA-*b*-PDMAEMA oligomers: A molecular dynamics simulation study. Ukrainian Conference with International Participation "Chemistry, Physics and Technology of Surface". Book of Abstracts. 19-20 October 2022, Kyiv, Ukraine. **2022**. p. 147.
50. Y.O. Gurova, A.D. Roshal, A.V. Kyrychenko. Molecular docking study of some inhibitors of β -glucosidase. IX міжнародна науково-практична конференція "Хімія, біо- і

нанотехнології, екологія та економіка в харчовій та косметичній промисловості”, Збірник матеріалів: 18-19 листопада 2021, Харків, **2021**, р. 26-30.

51. E.O. Logacheva, A.V. Kyrychenko. Molecular docking of some clinically approved drugs as dual-acting inhibitors for proteases of coronavirus SARS-CoV-2. IX міжнародна науково-практична конференція “Хімія, біо- і нанотехнології, екологія та економіка в харчовій та косметичній промисловості”, Збірник матеріалів: 18-19 листопада 2021, Харків, **2021**, р. 55-60.
52. O.N. Kalugin, D.S. Stepaniuk, M.M. Blazhynska, V.A. Koverga, S.M. Kovalenko, A.V. Kyrychenko, V.V. Ivanov, F.-A. Miannay, A. Idrissi, M.N. Volobuev. Dye-sensitized solar cells (DSSCs): current status and perspectives. IX Український з’їзд з електрохімії “Електрохімія сьогодення: Здобутки, проблеми та перспективи”, Колективна монографія: 21-23 вересня 2021, Київ, **2021**, р. 38-39.
53. Ю.О. Гурова, Р.С. Ходжаєва, А.О. Дорошенко, О.Д. Рошаль, О.В. Кириченко. Флуоресцентне визначення іонів лужноземельних металів барвником о-РОПОР в ацетонітрилі: Спектроскопічне дослідження та DFT розрахунки. XXII Міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених “Сучасні проблеми хімії”, Тези доповідей: 19-21 травня 2021, Київ, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, **2021**, р. 146.
54. Y.O. Gurova, R.S. Khodzhaieva, A.O. Doroshenko, A.D. Roshal, A.V. Kyrychenko. Fluorescence sensing of alkaline earth metal ions with ortho-POPOP dye in acetonitrile: spectroscopic and DFT study. XIII Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів “Хімічні Каразінські читання - 2021”, Тези доповідей: 20-21 квітня 2021 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, **2021**. Р. 98.
55. Y.O. Gurova, A.D. Roshal, A.V. Kyrychenko. Conformation tuning of ortho-POPOP by coordination with alkaline earth metal ions: DFT study. Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface”. Book of Abstracts. 21-22 October 2020, Kyiv, Ukraine. **2020**. p. 75.
56. M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, D.S. Stepaniuk, V.A. Koverga, A. Idrissi, O.N. Kalugin. Structure and dynamics of TiO₂-bound D205 dye in [Bmim][PF₆] ionic liquid: MD simulation study. Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface”. Book of Abstracts. 21-22 October 2020, Kyiv, Ukraine. **2020**. p. 105.
57. M. Blazhynska, A. Kyrychenko, S. Kovalenko, V. Ivanov, F.-A. Miannay, Oleg Kalugin, A. Idrissi. Molecular dynamics simulation and DFT study of dye-sensitized titanium dioxide nanoparticles. XVII Conference “Lviv Chemical Reading – 2019”, Book of Abstracts: June 2-5 2019, Lviv, Ukraine, **2019**, p. 344.
58. M. M. Blazhynska, A. V. Kyrychenko, O. N. Kalugin, A. Idrissi. Molecular dynamics simulations of TiO₂ nanoparticles / XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів “Хімічні Каразінські читання - 2019”, Тези доповідей: 22-24 квітня 2019 р. Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, **2019**. с. 13-14.
59. M. Koźbiał, M. Gil, A. Kyrychenko, M. Ceborska, J. Waluk. Fluorescence Spectroscopy Study of Cyclodextrin Inclusion Complexes with Bifunctional Heteroazaaromatic Molecules. Polish Photoscience Seminar 2018, Book of Abstracts. 11-14 June 2018, Krutyń, Poland, **2018**, p 42.
60. M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Atomistic Modelling of Silver Nanorods Coated with poly(Vinyl Alcohol). XI International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-11), May 21-25, 2018, Ivano-Frankivsk, Ukraine, **2018**, p. 151.

61. M.V. Slavgorodska, A.V. Kyrychenko. Molecular Dynamics Simulation of Conformational Dynamics of Pyrene-Labeled *poly*(Acrylic Acid). XI International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-11), May 21-25, 2018, Ivano-Frankivsk, Ukraine, **2018**, p. 136.
62. D. Svechkarev, A. Kyrychenko, W. Payne, A. Mohs. Self-Assembly Dynamics and Inner Morphology of Hydrophobically Modified Hyaluronic Acid Nanoparticles: Towards Design of Optimized Drug Nanocarriers. 255th American Chemical Society National Meeting and Expo, 18-22 March 2018, New Orleans, Luisiana, U.S.A, **2018**, POLY-363.
63. М.В. Славгородська, О. В. Кириченко. Вплив піренової мітки на структурно-динамічні властивості поліакрилової кислоти. XIII Всеукраїнської конференції молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. 2-4 травня 2018 р., м. Харків, Ексклюзив: Збірка праць, **2018**, с. 21.
64. М.В. Славгородська, О.В. Кириченко. Структурно-динамічні властивості поліакрилової кислоти, що містить гідрофобні піренові мітки. XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів: Хімічні Каразінські читання-2018. 23–25 квітня 2018, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна: Тези Доповідей. **2018**, с. 125-126.
65. М.В. Славгородська, О.В. Кириченко, Вплив рН та піренового замісника на структурно-динамічні властивості поліакрилової кислоти. XIX Міжнародна конференція студентів та аспірантів "Сучасні проблеми хімії", Тези доповідей, 22-24 Травня 2018, Київ: Київський національний університет імені Тараса Шевченка, **2018**, с. 159.
66. M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Stimuli-Responsive Adsorption of Poly-(2-Dimethylaminoethyl Methacrylate) onto Silver Nanoparticles: Molecular Dynamics Simulation Study. 8th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems, (PLMPP-2018)", 18-22 May, 2018, Kyiv: Book of Abstract. **2018**, p. 85.
67. A.V. Kyrychenko, M.M. Blazhynska, M.V. Slavgorodska, O.N. Kalugin. Molecular Dynamics Simulation of Silver Nanoparticles Functionalized with Stimuli-Responsive Polymers. 8th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems, (PLMPP-2018)", 18-22 May, 2018, Kyiv: Book of Abstract. **2018**, p.122.
68. М.М. Блажинська, О.В. Кириченко. Молекулярно-динамічне моделювання полі-(2-(диметиламіно)етилметакрилату. XIII Всеукраїнської конференції молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. 2-4 травня 2018 р., м. Харків, Ексклюзив: Збірка праць, **2018**, с. 7.
69. M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Molecular Dynamics Simulation of Stimuli-Responsive Coating of Silver Nanoparticles with Poly(2-(N,N-Dimethylamino)Ethyl Methacrylate). XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів: Хімічні Каразінські читання-2018. 23–25 квітня 2018, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна: Тези Доповідей. **2018**, с. 13-14.
70. M.M. Blazhynska, O. M. Matviichuk, A. V. Kyrychenko, Computational modelling of silver nanomaterials. VII Всеукраїнська студентська наукова конференція з міжнародною участю. "Academic and Scientific Challenges of Diverse Fields of Knowledge in the 21st Century", 2 Березня 2018; Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна: **2018**, с. 174-177.
71. M. M. Blazhynska, A. V. Kyrychenko, O. N. Kalugin. Molecular Dynamics Simulations of Silver Nanocubes and Nanobipyramides. V Международная научно-практическая конференция. Химия, Био- и Нанотехнологии, Экология и Экономика в Пищевой и Косметической Промышленности, 17-18 жовтня 2017, Харків: Сборник материалов. **2017**, с. 87-89.

72. M. M. Blazhynska, A. V. Kyrychenko, O. N. Kalugin. An Environmental Influence on the Structure of Sharp-Edged Silver Nanoparticles: Molecular Dynamics Simulation Study. IXth International Conference in Chemistry Kyiv-Toulouse. June 4-9, 2017, Kyiv, Book of Abstract, **2017**. p. 271.
73. M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.N. Kalugin. Reliability of the Lennard-Jones 12-6 Pair Potential in Classical Molecular Dynamics Simulations of Sharp-Edged Silver Nanostructures. Хімічні Каразінські читання – 2017: IX Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів, 18–20 квітня 2017 р.: Тези Доповідей. Харків. 2013. с. 139-140.
74. M.M. Blazhynska, A.V. Kyrychenko, O.M. Matviichuk. Antibacterial Properties of Silver Nanoparticles and Their Bioapplication. VI Всеукраїнська студентська наукова конференція з міжнародною участю. «*Academic and Scientific Challenges of Diverse Fields of Knowledge in the 21st Century*». 3 Березня 2017 р. Харків, с. 72-76.
75. A.V. Kyrychenko, D.A. Pasko, O.N. Kalugin. Molecular dynamics simulations of water-protecting effect of poly(vinyl alcohol) on a silver nanoparticle. 7-th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" (PLMMP-2016). 27–30 May 2016, Kyiv, CD of Abstracts, 2016. p. 125.
76. M. Vargas-Urbe, M. V. Rodnin, A. Kyrychenko, A. S. Ladokhin. Moving along the Free Energy Landscape of Membrane Insertion of the Diphtheria Toxin Translocation Domain. The Biophysical Society 59th Annual Meeting, 7 – 11 February 2015: CD of Abstracts. – Baltimore, Maryland, USA, 2015. – 2509-Plat.
77. M. Vargas-Urbe, M. V. Rodnin, A. Kyrychenko, G. Makhatadze, A. S. Ladokhin. Thermodynamics Landscape along the Membrane Insertion and Refolding Pathway of the Diphtheria Toxin T Domain. The 28th Annual Gibbs Conference on Biothermodynamics, 20 – 23 September 2014, Southern Illinois University, Carbondale, Illinois, U.S.A, 2014, P. 25.
78. Kyrychenko A., Rodnin M. V., Tobias D. J., Ladokhin A. S. Refining Analysis of Membrane Penetration with Depth-Dependent Fluorescence Quenching and Molecular Dynamics Simulations. The 2014 Biophysical Society 58th Annual Meeting, 15 – 19 February 2014, San Diego, California, U.S.A. 2569-Pos.
79. Kyrychenko A., He J., Wimley W.C., Ladokhin A. S. Structural Plasticity in the Topology of Membrane-Spanning Domain of HIV-1 gp41. The 2014 Biophysical Society 58th Annual Meeting, Feb. 15 – 19, 2014, San Diego, California, U.S.A. 2570-Pos.
80. Korsun O. M., Kyrychenko A. V., Gubin I. I., Kovalenko S. N, Kalugin O. N., Molecular Dynamics Simulations of Silver Nanoparticles Interacting with PVP: Force Field Model Development, 5th International Symposium: Methods and Applications of Computational Chemistry, 1-5 July 2013, Book of Abstracts Kharkiv, Ukraine, p. 122.
81. Vargas-Urbe M., Kyrychenko A., Rodnin M. V., Field C., Ladokhin A. S. pH-Dependent Interfacial Refolding and Transmembrane Insertion of Proteins, 245th American Chemical Society National Meeting, 7-11 April, 2013: Book of Abstracts, New Orleans, Louisiana, U.S.A, 2013, 216-Oral.
82. Rodnin M. V., Kyrychenko A., Kienker P. Sharma O., Vargas-Urbe M., Collier R. J., Finkelstein A., Ladokhin A. S. Comparison of Various Methods for Determining Functional Activity of the Diphtheria Toxin T-Domain. The 2012 Biophysical Society 56th Annual Meeting, Feb. 25 – Feb. 29, 2012, San Diego, California, U.S.A. 1236-Pos.
83. Vargas-Urbe M., Rodnin M. V., Kyrychenko A., Kienker P. Sharma O., Collier R. J., Finkelstein A., Ladokhin A. S. Replacement of C-Terminal Histidines Uncouples Membrane

Insertion and Translocation in Diphtheria Toxin T-Domain. The 2012 Biophysical Society 56th Annual Meeting, 25 –29 February 2012, San Diego, California, U.S.A. 1237-Pos.

84. Kyrychenko A., Rodnin M. V., Posokhov Y. O., Holt A., Pucci B., Killian J. A., Ladokhin A. S., Thermodynamic Measurements of Bilayer Insertion of a Single Transmembrane Helix. The 2012 Biophysical Society 56th Annual Meeting, 25 – 29 February 2012, San Diego, California, U.S.A. 2398-Pos.
85. Flores-Canales J. C., Kurnikov I., Simakov N., Rodnin M. V., Kyrychenko A., Ladokhin A. S., Kurnikova M. Mechanism of the pH-Triggered Formation of Membrane Competent State of the Diphtheria Toxin Translocation Domain Revealed by Simulations and Experiment. The 2011 Biophysical Society 55th Annual Meeting, 5 – 9 March 2011, Baltimore, Maryland, U.S.A. 1124-Pos.
86. Rodnin M. V., Kyrychenko A., Kienker P. Sharma O., Posokhov Y.O., Collier R. J., Finkelstein A., Ladokhin A. S. Conformational Switching of the Diphtheria Toxin T-Domain. The 2011 Biophysical Society 55th Annual Meeting, 5 – 9 March 2011, Baltimore, Maryland, U.S.A. 42-Plat.
87. Kyrychenko A., Rodnin M. V., Posokhov Y. O., Thoma A., Brettmann J., Ladokhin A. S. Kinetic and Thermodynamic Studies of pH-Triggered Membrane Insertion of Diphtheria Toxin T-Domain, The 2010 Biophysical Society 54th Annual Meeting, 20 – 24 February 2010, San Francisco, California, U.S.A. 2513-Pos, p485a.
88. Posokhov Y. O., Rodnin M. V., Kyrychenko A., Contino C., Pucci B., Ladokhin A. S., Thermodynamics of Interfacial Membrane Binding and Transmembrane Insertion of Diphtheria Toxin T-Domain: Fluorescence Correlation Spectroscopy Study, The 2010 Biophysical Society 54th Annual Meeting, 20 – 24 February 2010, San Francisco, California, U.S.A. 3245-Plat, p. 624a.
89. Kyrychenko A, Rodnin M. V., Posokhov Y.O., Ladokhin A. S. pH-Triggered Membrane Insertion Pathway of the Diphtheria Toxin T-Domain: 1. Insertion/Refolding Intermediate. The 2009 Biophysical Society 53rd Annual Meeting. 28.02.2009-04.03.2009, Boston, Massachusetts, U.S.A. 2231-Pos.
90. Rodnin M. V., Kyrychenko A, Posokhov Y. O., Brettmann J., Thoma A., Ladokhin A. S. pH-Triggered Membrane Insertion Pathway of the Diphtheria Toxin T-Domain: 2. Role of Histidines. The 2009 Biophysical Society 53rd Annual Meeting. 28 February – 04 March 2009, Boston, Massachusetts, U.S.A. 2232-Pos.
91. Posokhov Y. O., Rodnin M. V., Kyrychenko A., Holt A., Contino-Pepin C., Pucci B., Killian J. A., Ladokhin A. S. Can We Measure the Thermodynamic Stability of Membrane Proteins in a Lipid Bilayer Environment? The 2009 Biophysical Society 53rd Annual Meeting. 28 February – 04 March 2009, Boston, Massachusetts, U.S.A. 1706-Pos, p. B550.
92. Posokhov Y. O., Kyrychenko A., Rodnin M. V., Brettmann J., Contino C., Pucci B., Ladokhin A. S. Fluorinated Surfactants as Chaperones for Insertion/Folding of Membrane Proteins. Biophysical Society 52nd Annual Meeting and 16th IUPAB International Biophysical Congress. 02.02-06.02.2008, Long Beach, U.S.A., 2008, 1859-Plat, p. 80.
93. Rodnin M. V., Brettmann J., Kyrychenko A., Palchevskyy A. S., Ladokhin A. S. Role of Histidine Protonation in the pH-Triggered Membrane Insertion of Diphtheria Toxin T-Domain. Biophysical Society 52nd Annual Meeting and 16th IUPAB International Biophysical Congress. 02.02-06.02.2008, Long Beach, U.S.A., 2008, 39-Plat, p. 11.
94. Kijak M., Herbich J., Kyrychenko A. Thummel R.P., Waluk J. Excited State Intramolecular Proton Transfer in 2-(2'-Pyridyl)pyrrole. XX IUPAC Symposium on Photochemistry. 17.07-22.07.2004, Granada, Spain, 2004, p. 365.

95. Kyrychenko A., Gorski A., Waluk J. Tautomerization as a Tool for Matrix Site Assignments. Photoinduced Charge (Electron and Proton) Migration, Workshop, 30.05.-06.06.2004, Wdzydze, Poland, 2004, p. 3(6).
96. Kyrychenko A., Waluk J. Molecular dynamics simulations of site structure for porphyrin and porphycene in solid rare gases. XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy, 05.10-10.10. 2004, Krakow, Poland, 2004, p. 172.
97. Kijak M., Kyrychenko A., Herbich J., Toczek M., Thummel R.P., Waluk J. Solvent-induced *syn-anti* rotamerization in homologues of 2-(2'-pyridyl)indole – photophysical investigations and molecular dynamics simulations. XVth International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research, Berlin, Germany, 2003, p. 189.
98. Kyrychenko A., Herbich J., Kijak M., Waluk J. Environment-induced spectral and photophysical changes. Supramolecular Chemistry and New Materials, Workshop, 31.05.-04.06. 2003, Białowieża, Poland, 2003, p. 22.
99. Kyrychenko A., Andréasson J., Mårtensson J., Albinsson B. Media and temperature dependence of triplet-triplet energy transfer in porphyrin dimers. XX International Conference on Photochemistry 30.07.–04.08. 2001, Moscow, Russia, 2001, p. 256-257.
100. Kyrychenko A., Herbich J., Stepanenko Y., Thummel R.P., Waluk J. Spectral and theoretical studies of intermolecular hydrogen bonds between alcohols and heteroaromatic molecules. XIII Conference-Workshop – “Horizons in Hydrogen Bond Research”, 02.09-09.09.1999, Wrocław, Poland, 1999, p. 176.
101. Stepanenko Y., Nosenko E., Kyrychenko A., Waluk J., Thummel R.P., Mordzinski A. Laser jet spectroscopy of 2-(2'-pyridyl)indole and related compounds. XVIII International Symposium on Molecular Beams, 30.05-04.06.1999, Ameland, the Netherlands, 1999, p. 187.
102. Kirichenko A.V., Doroshenko A.O., Verezubova A.A., Ptyagina L.M., Schershukov V.M. Fluorescent properties and dynamics of the excited state structural relaxation of the oxadiazolic ortho-analogues of POPOP with the additional sterical hindrance. The Jabłoński Centennial Conference on Luminescence and Photophysics, 23.07-27.07.1998, Toruń, Poland, p. 75.

Document created December 20, 2024