

Сведения о научном руководителе по диссертации

Кривицкой Александры Вячеславовны

«Молекулярное моделирование механизмов ферментативных реакций, связанных с бактериальной резистентностью к β -лактамным антибиотикам»

Научный руководитель: Хренова Мария Григорьевна

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: профессор РАН

Должность: профессор кафедры физической химии

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

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 3

Тел.: 8(495) 939-48-40

E-mail: khrenovamg@my.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности за последние 5 лет:

1. Gavshina A.V., Solovyev I.D., Khrenova M.G., Boyko K.M., Varfolomeeva L.A., Minyaev M.E., Popov V.O., Savitsky A.P. The role of the correlated motion(s) of the chromophore in photoswitching of green and red forms of the photoconvertible fluorescent protein mSAASoti // *Scientific Reports*. – 2024. – V. 14. – № 8754. – P. 1-12.
2. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Evolution of Ceftriaxone Resistance of Penicillin-Binding Proteins 2 Revealed by Molecular Modeling // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – V. 24. – № 1. – P. 176-188.
3. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Interplay between the Enamine and Imine Forms of the Hydrolyzed Imipenem in the Active Sites of Metallo-beta-lactamases and in Water Solution // *Journal of Chemical Information and Modeling*. – 2022. – V. 62. – № 24. – P. 6519-6529.
4. Khrenova M.G., Mulashkin F.D., Nemukhin A.V. Modeling Spectral Tuning in Red Fluorescent Proteins Using the Dipole Moment Variation upon Excitation // *Journal of Chemical Information and Modeling*. – 2021. – V. 61. – № 10. – P. 5125-5132.
5. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Boronic Acids as Prospective Inhibitors of Metallo- β -Lactamases: Efficient Chemical Reaction in the Enzymatic Active Site Revealed by Molecular Modeling // *Molecules*. – 2021. – V. 26. – № 7. – P. 2026.
6. Khrenova M., Tsirelson V., Nemukhin A. Computational Characterization of the Substrate Activation in the Active Site of SARS-CoV-2 Main Protease // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. – 2020. – V. 7. – № 3. – P. 33-40.

Ученый секретарь

диссертационного совета МГУ.015.5,

П.В. Фурсова

Подпись, печать