

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Крапивина Владимира Борисовича

«Молекулярное моделирование биохимических реакций нитроксильных радикалов и динитрозильных комплексов железа»

Ф.И.О.: Немухин Александр Владимирович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная(ые) специальность(и): 02.00.04 – Физическая химия (хим. науки)

Должность: профессор

Место работы: ФГБОУ ВО МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Кафедра физической химии

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

Тел.: +7 (495) 939-10-96

E-mail: anem@lcc.chem.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. Giudetti G., Polyakov I., Grigorenko B. L., Faraji S., Nemukhin A. V., Krylov A. I. How Reproducible Are QM/MM Simulations? Lessons from Computational Studies of the Covalent Inhibition of the SARS-CoV-2 Main Protease by Carmofur // *Journal of Chemical Theory and Computation*. – 2022. – V. 18. – № 8. – P 5056-5067.
2. Sen T., Ma Y., Polyakov I. V., Grigorenko B. L., Nemukhin A. V., Krylov A. I. Interplay between locally excited and charge transfer states governs the photoswitching mechanism in the fluorescent protein Dreiklang // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2021. – V. 125. – №. 3. – P. 757-770.
3. Khrenova M. G., Bulavko E. S., Mulashkin F. D., Nemukhin A. V. Mechanism of Guanosine Triphosphate Hydrolysis by the Visual Proteins Arl3-RP2: Free Energy Reaction Profiles Computed with Ab Initio Type QM/MM Potentials // *Molecules*. – 2021. – V. 26. – №. 13. – P. 1-15.
4. Grigorenko B. L., Domratcheva T., Polyakov I. V., Nemukhin A. V. Protonation States of Molecular Groups in the Chromophore-Binding Site Modulate Properties of the Reversibly Switchable Fluorescent Protein rsEGFP2 // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. – 2021. – V. 12. – №. 34. – P. 8263-8271.

5. Krivitskaya A. V., Khrenova M. G., Nemukhin A. V. Two Sides of Quantum-Based Modeling of Enzyme-Catalyzed Reactions: Mechanistic and Electronic Structure Aspects of the Hydrolysis by Glutamate Carboxypeptidase // *Molecules*. – 2021. – V. 26. – №. 20. – P. 6280.
6. Nemukhin A. V., Grigorenko B. L., Polyakov I. V., Lushchekina S. V. Computational modeling of the SARS-CoV-2 main protease inhibition by the covalent binding of prospective drug molecules // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. – 2020. – V. 7. – №. 3. – P. 25-32.
7. Grigorenko B. L., Novichkova D. A., Lushchekina S. V., Zueva I. V., Schopfer, L. M., Nemukhin A. V., Varfolomeev S. D., Lockridge O., Masson P. Computer-designed active human butyrylcholinesterase double mutant with a new catalytic triad // *Chemico-Biological Interactions*. – 2019. – V. 306. – P. 138-146.

Ф.И.О.: Дьячков Павел Николаевич

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная(ые) специальность(и): 02.00.04 – Физическая химия (хим. науки)

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, лаборатория квантовой химии

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинский проспект, 31

Тел.: +7 (495) 952-07-87

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. Pavel N. D'yachkov. Quantum Chemistry of Nanotubes Electronic Cylindrical Waves. CRC Press Taylor & Francis Group. London, New York, 2019. 221 p. (Монография).
2. E. P. D'yachkov, and P. N. D'yachkov. Gold Nanosolenoids Based on Chiral Nanotubes Calculated Using the Relativistic Linearized Augmented Cylindrical Wave Method. *J. Phys. Chem. C*. 2019, 123, 42, 26005-26010. DOI:10.1021/acs.jpcc.9b07610
3. P.N. D'yachkov, D.O. Krasnov. Electronic and transport properties of deformed platinum nanotubes calculated using relativistic linear augmented cylindrical wave method. *Chemical Physics Letters*. 720 (2019) 15–18. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.02.006>

4. S. Piskunov, O. Lisovski, Y. F. Zhukovskii, R.A. Evarestov, P. N. D'yachkov. First-Principles Evaluation of the Morphology of WS₂ Nanotubes for Application as Visible-Light-Driven Water-Splitting Photocatalysts. ACS Omega 2019, 4, 1434–1442. DOI:10.1021/acsomega.8b03121
5. P.N. D'yachkov, I.A. Bochkov. Ab initio band structure of quasi-metallic carbon nanotubes for terahertz applications. Computer Modelling & New Technologies 2018 22, no 1, 1-19. <http://www.cmnt.lv/en/on-line-journal/2018/2018-volume-22--1>
6. Pavel N. D'yachkov and Evgeny P. D'yachkov. Modeling of Nanoscale Electromagnets Based on Gold Finite Nanosolenoids. ACS Omega.2020, V. 5, P 5529–5533. <https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.0c0016>
7. Pavel N. D'yachkov. Chiral gold nanotubes for nano-solenoid antennas. Chemical Physics Letters. 2020, V. 752, 137542. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2020.137542>
8. Pavel N. D'yachkov. Chiral gold nanotubes for nano-solenoid magnetic receiving loop antennas. Chemical Physics Letters, V. 782, 139032 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.139032>
9. Yin-Pai Lin, Inta Isakovica, Pavel N. D'yachkov et al. Time-Dependent Density Functional Theory Calculations of N- and S-Doped TiO₂ Nanotube for Water-Splitting Applications. Nanomaterials 2021, 11, 2900. <https://doi.org/10.3390/nano11112900>
10. Pavel N. D'yachkov and Evgeny P. D'yachkov. Rashba spin–orbit interaction effect in twisted silicon nanotubes for chiral spintronics. Appl. Phys. Lett. 120, 173101 (2022); doi: 10.1063/5.0086902

Ф.И.О.: Палюлин Владимир Александрович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

Научная(ые) специальность(и): 02.00.03 – Органическая химия

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: ФГБОУ ВО МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза

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

Тел.: +7 (495) 939-39-69

E-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. Shulga D. A., Ivanov N. N., Palyulin V. A. In Silico Structure-Based Approach for Group Efficiency Estimation in Fragment-Based Drug Design Using Evaluation of Fragment Contributions // *Molecules*. – 2022. – V. 27. – №. 6. – P. 1985.
2. Pisarev S. A., Palyulin V. A. Conformational effects of 1, 5, 9-substitution in symmetric bicyclo[3.3.1]nonane analogues // *Mendeleev Communications*. – 2021. – V. 31. – №. 5. – P. 612-614.
3. Shulga D. A., Ivanov N. N., Palyulin V. A. Reverse fragment based drug discovery approach via simple estimation of fragment contributions // *Mendeleev Communications*. – 2021. – V. 31. – №. 3. – P. 291-293.
4. Shulga D. A., Shaimardanov A. R., Palyulin V. A. Anisotropic electrostatic models of nitrogen and phosphorus: the variation and the interpretability of the electrostatic parameters in response to structure variation // *Mendeleev Communications*. – 2020. – V. 30. – №. 6. – P. 741-743.
5. Makhaeva G. F., Kovaleva N. V., Boltneva N. P., Lushchekina S. V., Rudakova E. V., Stupina T. S., Terentiev A. A., Serkov I. V., Proshin A. N., Radchenko E. V., Palyulin V. A., Bachurin S.O., Richardson R. J. Conjugates of tacrine and 1,2,4-thiadiazole derivatives as new potential multifunctional agents for Alzheimer's disease treatment: Synthesis, quantum-chemical characterization, molecular docking, and biological evaluation // *Bioorganic Chemistry*. – 2020. – V. 94. – P. 103387.
6. Guseynov A. A. D., Pisarev S. A., Shulga D. A., Palyulin V. A., Fedorov M. V., Karlov D. S. Computational characterization of the glutamate receptor antagonist perampanel and its close analogs: density functional exploration of conformational space and molecular docking study // *Journal of Molecular Modeling*. – 2019. – V. 25. – №. 10-312. – P. 1-13.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ 014.3(МГУ.02.04),

к.х.н., доцент Шилина Марина Ильинична



Подпись, печать