

Сведения о научном руководителе
по диссертации Мулашкиной Татьяны Игоревны
*«Определение механизмов разрыва Р-О связи в активных центрах
ферментов методами молекулярного моделирования»*

Научный руководитель: Хренова Мария Григорьевна

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без звания, профессор РАН

Научная(ые) специальность(и): 02.00.17 *Математическая и квантовая химия (физ.-мат. науки)*

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

Должность: профессор кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3

Тел.: 8 (495) 939-22-86

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

Второе место работы: Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»

Должность: руководитель группы молекулярного моделирования Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»

Адрес места работы: 119071, г. Москва, Ленинский проспект, д.33, стр. 2

Тел.: 8 (495) 954-52-83

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

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет: *(указывается от 3 до 5)*

1. Kapusta D.P., Mulashkin F.D., **Khrenova M.G.** Keto-enol tautomerism of the 4,5-dimethyl-2-(2'-hydroxyphenyl)imidazole in water solution: Modeling equilibrium between neutral forms and accurate assignment of the absorption bands // International Journal of Quantum Chemistry. – 2021. – Vol. 121, № 8. – P. e26577.

2. Levina E.O., **Khrenova M.G.**, Astakhov A.A., Tsirelson V.G. Keto-enol tautomerism from the electron delocalization perspective // Journal of Computational Chemistry. – 2022. – Vol. 43, №. 15. – P. 1000-1010.
3. Grigorenko B.L., Polyakov I.V., **Khrenova M.G.** et al. Multiscale simulations of the covalent inhibition of the SARS-CoV-2 main protease: Four compounds and three reaction mechanisms // Journal of the American Chemical Society. – 2023. – Vol. 145, № 24. – P. 13204–13214.
4. Polyakov I.V., **Khrenova M.G.** Molecular modelling of luciferyl adenylate deprotonation in the active site of photinus pyralis luciferase // Molecular Physics. – 2024. – P. e2397077.
5. Grigoryeva M.A., **Khrenova M.G.**, Zvereva M.I. Nanoporeinspect: An interactive tool for evaluating nanopore sequencing quality and ligation efficiency // Journal of Bioinformatics and Computational Biology. – 2025. – Vol. 23, № 04. – P. 2550011.

Ученый секретарь

диссертационного совета МГУ 014.3,

М.И. Шилина

Подпись, печать