

Отзыв научного руководителя
на диссертацию аспиранта химического факультета МГУ имени
М.В. Ломоносова Мулашкиной Татьяны Игоревны
на тему: «Определение механизмов разрыва Р-О связи в активных центрах
ферментов методами молекулярного моделирования»

Мулашкина Т.И. окончила специалитет химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова в 2021 году. С 2021 года по настоящее время обучается в аспирантуре кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. Работает младшим научным сотрудником лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования.

За время работы над диссертацией Мулашкина Т.И. освоила современные методы молекулярного моделирования и квантовой химии, которые она применяла для расчетов молекулярных механизмов ферментативных реакций, сопровождающихся разрывом Р-О связи в фосфорорганических соединениях.

Основные результаты диссертационной работы изложены в семи публикациях в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в РИНЦ и Web of Science. Основные результаты работы были представлены в виде устных и стеновых докладов на следующих конференциях: Международная научная конференция «Современная химическая физика – на стыке физики, химии и биологии» (Черноголовка, 2021), XXIX-XXXI Международная научная конференция «Математика. Компьютер. Образование.» (Дубна, 2022, Москва, 2023, Дубна, 2024), Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (Москва, 2022, 2023, 2024), IX-X Всероссийская научная молодежная школа-конференция «Химия, физика, биология: пути интеграции» (Москва, 2022, 2024), XXII-XXIII Ежегодная молодежная конференция с международным участием ИБХФ РАН-ВУЗы «Биохимическая физика» (Москва, 2022, 2023), XXXV Зимняя молодежная научная школа «Перспективные направления физико-химической биологии и биотехнологии» (Москва, 2023), XVII-XIX Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование» (Саров, 2023, 2024, 2025), 13-я Международная научная конференция «Биокатализ. Фундаментальные исследования и

применения» (Сузdalь, 2023), 66-я Всероссийская научная конференция МФТИ (Москва, 2024), XXVII Всероссийская конференция молодых ученых-химиков (Нижний Новгород, 2024), XIII International conference on chemistry for young scientists «Mendeleev» (Санкт-Петербург, 2024), XXX Symposium on bioinformatics and computer-aided drug discovery (Онлайн, Россия, 2024).

Наряду с исследовательской работой, Мулашкина Т.И. активно участвовала в педагогической деятельности. За время учебы в аспирантуре Татьяна Игоревна проводила семинары по курсам: «Основы квантовой механики» и «Квантовой химии и строения молекул» у студентов 302 группы (2023-2024 уч. г.) и 305 группы (2024-2025 уч. г.) и «Математические методы химии» у студентов 413 группы (2023-2024 уч.г.) и 313 группы (2024 г.). Помимо этого, Мулашкина Т.И. являлась руководителем шести курсовых работ и научно-исследовательской работы студентов кафедры физической химии.

Мулашкина Т.И. является инициативным, самостоятельным исследователем, обладает высокой квалификацией, способна самостоятельно ставить и решать задачи.

Диссертационная работа Мулашкиной Т.И. «Определение механизмов разрыва Р-О связи в активных центрах ферментов методами молекулярного моделирования» соответствует критериям, определённым в Положении о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова. Считаю, что диссертация Мулашкиной Т.И. может быть представлена к защите.

Профессор кафедры физической химии
химического факультета Федерального
государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова»
доктор физико-математических наук,
профессор РАН
(специальность 02.00.17 - Математическая и
квантовая химия)

09.09.2025

Хренова Мария Григорьевна
Москва, Ленинские горы, 1, с. 3
8 (495) 939-22-86
mkhrenova@lcc.chem.msu.ru