

Сведения о ведущей организации

по диссертации Горн Маргариты Викторовны

«Высокоточные квантовохимические расчеты кинетики и механизма термического

разложения энергетических гетероциклических соединений»

по специальности – 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.


на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	МГУ имени М.В.Ломоносова или МГУ
Полное наименование факультета и кафедры	Химический факультет, кафедра физической химии
Почтовый индекс, адрес организации	119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Веб-сайт	www.msu.ru
Телефон	(495) 939-10-00
Адрес электронной почты	info@rector.msu.ru
Список основных публикаций работников структурного подразделения, составляющего отзыв, за последние пять лет по теме диссертации (не более 15 публикаций)	<ol style="list-style-type: none">1. 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. – V. 43. – №. 15. – P. 1000-1010.2. Kulakova A. M., Mulashkina, T. I., Nemukhin, A. V., Khrenova, M. G. Influence of the leaving group on the mechanism of hydrolysis of organophosphorus compounds by phosphotriesterase from bacterium Pseudomonas diminuta //Russian Chemical Bulletin. – 2022. – V. 71. – №. 5. – P. 921-926.

3. Levina E. O., Khrenova M. G., Tsirelson V. G. The explicit role of electron exchange in the hydrogen bonded molecular complexes //Journal of Computational Chemistry. – 2021. – V. 42. – №. 12. – P. 870-882.
4. Khrenova M. G., Grigorenko B. L., Nemukhin A. V. Molecular Modeling Reveals the Mechanism of Ran-RanGAP-Catalyzed Guanosine Triphosphate Hydrolysis without an Arginine Finger //ACS Catalysis. – 2021. – V. 11. – №. 15. – P. 8985-8998.
5. 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. – V. 121. – №. 8. – P. e26577.
6. 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.
7. Kapusta D. P., Kulakova A. M., Khrenova M. G. Modeling the Tautomeric Equilibrium and Absorption Spectrum of 4, 5-Dimethyl-2-(2'-hydroxyphenyl) imidazole //Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2020. – V. 94. – №. 5. – P. 945-950.
8. Bartashevich E. V., Matveychuk, Y. V., Mukhitdinova, S. E., Sobalev, S. A., Khrenova, M. G., Tsirelson, V. G. The common trends for the halogen, chalcogen, and pnictogen bonds via sorting principles and local bonding properties //Theoretical Chemistry Accounts. – 2020. – V. 139. – №. 2. – P. 1-13.
9. Nemukhin A. V., Grigorenko, B. L., Khrenova, M. G., Krylov, A. I. Computational challenges in modeling of representative bioimaging proteins: GFP-like proteins, flavoproteins, and phytochromes //The Journal of Physical Chemistry B. – 2019. – V. 123. – №. 29. – P. 6133-6149.
10. Khrenova M. G., Krivitskaya A. V., Tsirelson V. G. The QM/MM-QTAIM approach reveals the nature of the different reactivity of cephalosporins in the active site of L1 metallo- β -lactamase //New Journal of Chemistry. – 2019. – V. 43. – №. 19. – P. 7329-7338.
11. Khrenova M. G., Nemukhin A. V. Modeling the transient kinetics of the L1 metallo- β -lactamase //The Journal of Physical Chemistry B. – 2018. – V. 122. – №. 4. – P. 1378-1386.

	<p>12. Khrenova M. G., Kulakova A. M., Nemukhin A. V. Competition between two cysteines in covalent binding of biliverdin to phytochrome domains //Organic & Biomolecular Chemistry. – 2018. – V. 16. – №. 40. – P. 7518-7529.</p> <p>13. Grigorenko B. L., Khrenova M. G., Nemukhin A. V. Amide–imide tautomerization in the glutamine side chain in enzymatic and photochemical reactions in proteins //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2018. – V. 20. – №. 37. – P. 23827-23836.</p>
--	--

Зам. зав. кафедрой физической химии по научной работе, д.х.н, проф. РАН


_____ М.Г. Хренова

Зам. декана химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова

по научной работе, д.х.н.


_____ М.Э.Зверева

Проректор Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»,
д.ф.-м.н.


_____ А.А.Федянин
21.10.22

