

Сведения об оппоненте

по диссертации Тупикиной Елены Юрьевны

на тему «Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Фамилия Имя Отчество	Ходов Илья Анатольевич
Ученая степень, шифр и название специальности (которые были получены при защите), ученое звание	Доктор физико-математических наук по специальности 03.01.02 – Биофизика
Основное место работы (полное и сокращенное наименование организации в соответствии с уставом), почтовый адрес	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, ФИЦ ХФ РАН, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.4
Должность, подразделение	Ведущий научный сотрудник лаборатории функциональных нанокмполитов
Почтовый адрес оппонента (можно указывать адрес места работы, указать индекс)	119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.4
Телефон	8-920-670-7675
Адрес электронной почты	ilya.khodov@gmail.com

Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)

1. Sobornova V. V., Belov K. V., Krestyaninov M. A., Khodov I. A. Influence of Solvent Polarity on the Conformer Ratio of Bicalutamide in Saturated Solutions: Insights from NOESY NMR Analysis and Quantum-Chemical Calculations // International Journal of Molecular Sciences. 2024. Vol. 25, No. 15. Art. 8254. DOI: 10.3390/ijms25158254.
2. Sobornova V. V., Mulloyarova V. V., Belov K. V., Dyshin A. A., Tolstoy P. M., Kiselev M. G., Khodov I. A. Structural and Sorption Characteristics of Nanocellulose Aerogel-Based Composite Materials Doped with Mefenamic and Flufenamic Acids: Insights from Magic Angle Spinning and High-Pressure NMR Spectroscopy // Journal of Physical Chemistry Letters. 2025. Vol. 16, No. 26. P. 6817–6824. DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c01303.
3. Kobchikova P. P., Bakirov B. A., Ryltsev R. E., He X., Khodov I. A. Machine Learning Interatomic Potentials in Biomolecular Modeling: Principles, Architectures, and Applications // Biophysical Reviews. 2025. Vol. 17, No. 5. P. 1241–1253. DOI: 10.1007/s12551-025-01351-5.
4. Li S., Xiong D., Klochkov V. V., Khodov I. A., He X. Molecular Dynamics Reveals Novel Small-Molecule Inhibitors Block PD-1/PD-L1 by Promoting PD-L1 Dimer Stability // Physical Chemistry Chemical Physics. 2025. Vol. 27, No. 46. P. 24932–24947. DOI: 10.1039/D5CP03584H.
5. Isaev Y. I., Makarov D. M., Khodov I. A. Machine Learning Prediction of NMR Shifts for Rare and Transition Metal Complexes (45Sc, 49Ti, 89Y, 91Zr, 139La) // Journal of Molecular Liquids. 2025. Vol. 437. Art. 128417. DOI: 10.1016/j.molliq.2025.128417.

6. Khodov I. A., Huster D., Scheidt H. A. The Interaction of Small Molecules with Phospholipid Membranes Studied by Solid-State NMR and Molecular Dynamics Simulation // Biophysical Reviews. 2025. Vol. 17, No. 5. P. 1401–1413. DOI: 10.1007/s12551-025-01335-5.
7. Mololina A. A., Sobornova V. V., Belov K. V., Krestyaninov M. A., Khodov I. A. Role of Non-Covalent Interactions in the Conformational Stability of Bicalutamide in Different Solvent Environments: Insights from Quantum-Chemical Calculations and NMR Spectroscopy // Journal of Molecular Liquids. 2025. Vol. 423. Art. 126921. DOI: 10.1016/j.molliq.2025.126921.
8. Wei Y., Zhong C., Sun Y., Ma S., Ni M., Wu X., Yan Y., Yang L., Khodov I. A., Ge J., Li Y., Lin D., Wang Y., Bao Q., Zhang H., Wang S., Song J., Lin J., Xie L., Huang W. C–H-Activated $\text{Csp}^2\text{--Csp}^3$ Diastereoselective Gridization Enables Ultraviolet-Emitting Stereo-Molecular Nanohydrocarbons with Multiple $\text{H}\cdots\text{H}$ Interactions // Nature Communications. 2024. Vol. 15, No. 1. Art. 5438. DOI: 10.1038/s41467-024-48130-6.
9. Sobornova V. V., Khodov I. A. Quantitative ^{29}Si NMR Spectroscopy of Ordered Mesoporous Silicas: Revisiting Q3/Q4 Ratios and Surface Hydroxylation in SBA-15 and MCM-41 // Physical Chemistry Chemical Physics. 2026. Vol. 28, No. 5. P. 3540–3549. DOI: 10.1039/D5CP03966E.
10. Ksenofontov A. A., Lukanov M. M., Bichan N. G., Khodov I. A., Kudryakova N. O., Ksenofontova K. V., Antina E. V. Non-Covalent Supramolecular Systems with Photoinduced Electron Transfer Based on Zinc Bis(dipyrrromethenate)s and C_{60} // Dyes and Pigments. 2021. Vol. 185. Art. 108918. DOI: 10.1016/j.dyepig.2020.108918.
11. Gamov G. A., Zavalishin M. N., Pimenov O. A., Klochkov V. V., Khodov I. A. La(III), Ce(III), Gd(III), and Eu(III) Complexation with Tris(hydroxymethyl)aminomethane in Aqueous Solution // Inorganic Chemistry. 2020. Vol. 59, No. 23. P. 17783–17793. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.0c03082.


_____/И.А. Ходов/
Подпись

« 29 » июня 2026 г.

Верно.

Ученый секретарь Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук


_____/М.Г. Михалева /
Подпись
(М.П.)
