

Сведения о научном руководите диссертации

Кулаковой Анны Михайловны

«Молекулярное моделирование механизмов реакций нуклеофильного присоединения остатков цистеина белков к органическим молекулам»

Научный руководитель: Хренова Мария Григорьевна

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: нет

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра физической химии, лаборатория химической кибернетики

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

Тел.: +7 (495) 939-20-35

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

Список основных научных публикаций по специальности 02.00.15 – «Кинетика и катализ» за последние 5 лет:

1. Kots E. D., Khrenova M. G., Nemukhin A. V. Allosteric Control of N-Acetyl-Aspartate Hydrolysis by the Y231C and F295S Mutants of Human Aspartoacylase // Journal of Chemical Information and Modeling, 2019, том 59, № 5, с. 2299-2308
2. Nemukhin A. V., Grigorenko B. L., Khrenova M. G., Krylov A. Computational Challenges in Modeling of Representative Bioimaging Proteins: GFP-Like Proteins, Flavoproteins, and Phytochromes // Journal of Physical Chemistry B, 2019, том 123, № 29, с. 6133-6149
3. Kapusta D. P., Firsov D. A., Khrenova M. G., Grigorenko B. L., Nemukhin A. V. Effect of solvation water shells on enzyme active sites in zinc-dependent hydrolases // Structural Chemistry, 2019, том 30, № 2, с. 481-488
4. Khrenova M.G., Tomilko A.V., Tsirelson V.G. Electronic Steric Factors in the Active Site of Metallo-beta-Lactamase and Reactivity of Cephalosporin Antibiotics // Moscow University Chemistry Bulletin, 2019, том 74, № 3, с. 106-110

5. Meteleshko Y. I., Nemukhin A. V., Khrenova M. G. Novel flavin-based fluorescent proteins with red-shifted emission bands: a computational study // Photochemical and Photobiological Sciences, 2019, том 18, с. 177-189
6. Khrenova M. G., Nemukhin A. V., Tsirelson V. G. Origin of the pi-stacking induced shifts in absorption spectral bands of the green fluorescent protein chromophore // Chemical Physics, 2019, том 522, с. 32-38
7. Khrenova M. G., Krivickaya A. V., Tsirelson V. G. The QM/MM-QTAIM approach reveals the nature of different reactivity of cephalosporins in the active site of L1 metallo-beta-lactamase // New Journal of Chemistry, 2019, том 43, с. 7329-7338
8. Коц Е.Д., Хренова М.Г., Немухин А.В., Варфоломеев С.Д. Аспартоацилаза - фермент центральной нервной системы: структура, каталитическая активность, механизмы регуляции // Успехи химии, 2019, том 88, № 1, с. 1-26
9. 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, том 20, № 37, с. 23827-23836
10. Kapusta D. P., Meteleshko Y. I., Babchuk I. V., Khrenova M. G. Applications of High Performance Computing: Born–Oppenheimer Molecular Dynamics of Complex Formation in Aqueous Solutions // Supercomputing Frontiers and Innovations, 2018, том 5, № 3, с. 70-73
11. Khrenova M. G., Kulakova A. M., Nemukhin A. V. Competition between two cysteines in covalent binding of biliverdin to phytochrome domains // Organic and Biomolecular Chemistry, 2018, том 16, с. 7518-7529
12. Goryashchenko A. S., Khrenova M. G., Savitsky A. P. Detection of protease activity by fluorescent protein FRET sensors: from computer simulation to live cells // Methods and applications in fluorescence, 2018, том 6, с. 022001
13. Khrenova M. G., Nemukhin A. V. Modeling the Transient Kinetics of the L1 Metallo- β -Lactamase // Journal of Physical Chemistry B, 2018, том 122, № 4, с. 1378-1386
14. Stepashkina A., Fedorchuk E., Fedorchuk V., Sklyarenko A., Yarotsky S., Khrenova M., Pometun A., Savin S., Tishkov V. Site-directed mutagenesis of the recombinant alpha-amino acid ester hydrolase from *Xanthomonas rubrilineans* // FEBS open bio, 2018, том 8, № S1, с. 186-187
15. Polyakov I. V., Khrenova M. G., Moskovsky A. A., Shabanov B. M., Nemukhin A. V. Towards first-principles calculation of electronic excitations in

the ring of the protein-bound bacteriochlorophylls // Chemical Physics, 2018, том 505, с. 34-39

16. Кулакова А.М., Хренова М.Г., Немухин А.В. Моделирование спектров мутантных форм красных флуоресцентных белков // Вестник Московского университета. Серия 2: Химия, 2018, том 59, № 5, с. 332-336

17. Polyakov I.V., Khrenova M.G., Moskovskii A.A., Telegin P.N., Zhang J.P., Nemukhin A.V. Evaluation of the Q y absorption band maximum in a light-harvesting complex of the bacterial photosynthetic center Thermochromatium tepidum // Moscow University Chemistry Bulletin, 2017, том 72, № 3, с. 111-114

18. Khrenova M.G., Polyakov I.V., Grigorenko B.L., Krylov A.I., Nemukhin A.V. Improving the Design of the Triple-Decker Motif in Red Fluorescent Proteins // Journal of Physical Chemistry B, 2017, том 121, № 47, с. 10602-10609

19. Khrenova M. G., Solovyev I. D., Lapshin G. D., Savitsky A. P. Molecular mechanism of interactions between MMP-2 and its oligopeptide-based inhibitors // Mendeleev Communications, 2017, том 27, № 2, с. 157-159

20. Khrenova M. G., Domratcheva T. M., Nemukhin A. V. Molecular mechanism of the dark-state recovery in BLUF photoreceptors // Chemical Physics Letters, 2017, том 676, с. 25-31

21. Khrenova M. G., Meteleshko Y. I., Nemukhin A. V. Mutants of the Flavoprotein iLOV as Prospective Red-Shifted Fluorescent Markers // Journal of Physical Chemistry B, 2017, том 121, № 43, с. 10018-10025

22. Varfolomeev S.D., Kots E.D., Khrenova M.G., Lushchekina S.V., Nemukhin A.V. Supercomputer Technologies for Structural-Kinetic Study of Mechanisms of Enzyme Catalysis: A Quantum-Chemical Description of Aspartoacylase Catalysis // Doklady Physical Chemistry, 2017, том 474, № 4, с. 444-447

23. Khrenova M. G., Kots E. D., Varfolomeev S. D., Lushchekina S. V., Nemukhin A. V. Three Faces of N-Acetylaspargate: Activator, Substrate and Inhibitor of Human Aspartoacylase // Journal of Physical Chemistry B, 2017, том 121, № 40, с. 9389-9397

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.02.08.,

Сакодынская Инна Карловна

23 октября 2019 года

