

Портфолио аспиранта

			Кривицкая Александра Вячеславовна		
Направление	06.06.01	Биологические науки			
Профиль	03.01.04	Биохимия			
Срок обучения	21.09.2020	20.09.2024			
Лаборатория (подразделение)	группа молекулярного моделирования				
Научный руководитель	д. ф.-м. н., рук. группы Хренова М.Г.				
Тема научной работы	Молекулярное моделирование реакционной способности и механизмов ингибирования металло-бета-лактамаз				
Успеваемость					
дисциплина	дата экзамена		оценка		
Специальность (биохимия)	-		-		
Иностранный язык	-		-		
История и философия науки реферат	-		-		
Публикации					
<i>Статьи</i>					
1. Maria G. Khrenova, Alexandra V. Krivitskaya, Vladimir G. Tsirelson. The QM/MM-QTAIM approach reveals the nature of different reactivity of cephalosporins in the active site of L1 metallo- β -lactamase// New Journal of Chemistry, 2019. - № 43, - P. 7329-7338.					
2. Кривицкая А.В., Пометун А.А., Паршин П.Д., Хренова М.Г., Урлахер В.Б., Тишков В.И. Моделирование полной структуры трехдоменной монооксигеназы CYP102A1 BM3 из <i>Bacillus megaterium</i> // Вестник Московского университета, серия 3, 2020. - № 61, - С. 202-207.					
<i>Тезисы докладов</i>					
1. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Взаимодействие антибиотиков с активным центром металло-бета-лактамазы: реконструкция электронных факторов. XXV Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Дубна, 29 января – 3 февраля 2018, стр.69.					
2. Кривицкая А.В. Об электронных факторах, определяющих каталитические константы гидролиза цефалоспориновых антибиотиков металло- β -лактамазой. XXV Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов – 2018», 9-13 апреля 2018, стр.857.					

3. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Особенности электронной плотности и взаимодействия цефалоспориновых антибиотиков с активным центром металло- β -лактамазы. XIV Международный конгресс молодых ученых по химии и химической технологии, 30 октября-2 ноября 2018, стр.9.
4. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Особенности электронной плотности и взаимодействия цефалоспориновых антибиотиков с активным центром металло- β -лактамазы. X Научно-практическая конференция «Образование и наука для устойчивого развития», 31 октября-2 ноября 2018, стр.69.
5. Кривицкая А. В., Хренова М. Г., Цирельсон В. Г. Электронные факторы, характеризующие особенности взаимодействия антибиотиков цефалоспоринового ряда с металло- β -лактамазой. XVII Ежегодная молодежная конференция с международным участием ИБХФ РАН-ВУЗы «Биохимическая Физика». Москва, ИБХФ им. Н. М. Эмануэля РАН, 13-15 ноября 2018.
6. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Особенности электронной плотности и ключевые взаимодействия в реакции гидролиза антибиотиков цефалоспоринового ряда металло β -лактамазой. XXVI Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Пушкино, 28 января – 2 февраля 2019, стр.44.
7. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Расчет каталитических констант реакции гидролиза цефалоспориновых антибиотиков металло- β -лактамазой с использованием характеристик электронной плотности. XXXVI Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике. МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва, 18-21 марта 2019, стр.54.
8. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Анатомия водородной связи N...H в комплексах метанол-имидазол: влияние заместителей в газовой фазе и растворе. XXVII Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование».

Участие в конкурсах, проектах

соисполнитель гранта РФФИ № 18-74-10056