

## Портфолио аспиранта

	Кривицкая Александра Вячеславовна	
Направление подготовки	06.06.01	Биологические науки
Профиль	1.5.4	Биохимия
Срок обучения	20.09.2020	20.09.2024
Лаборатория (подразделение)	Группа молекулярного моделирования	
Научный руководитель	д. ф.-м. н., рук. группы Хренова Мария Григорьевна	
Тема научной работы	Молекулярное моделирование механизмов реакций ферментов, связанных с бактериальной резистентностью к $\beta$ -лактамным антибиотикам	
Успеваемость		
дисциплина	дата экзамена	оценка
Специальность (указать)	-	-
Иностранный язык	26.05.2021	отлично
История и философия науки реферат	23.03.2022	хорошо
Публикации		
<i>Статьи</i>		
1. 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 2: Химия. – 2020. – Vol. 61. – с. 202-207.		
2. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Boronic Acids as Prospective Inhibitors of Metallo- $\beta$ -Lactamases: Efficient Chemical Reaction in the Enzymatic Active Site Revealed by Molecular Modeling // <i>Molecules</i> . – 2021. – Vol. 26 (7). – P. 2026.		
3. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G., Nemukhin A.V. Two Sides of Quantum-Based Modeling of Enzyme-Catalyzed Reactions: Mechanistic and Electronic Structure Aspects of the Hydrolysis by Glutamate Carboxypeptidase // <i>Molecules</i> . – 2021. – Vol. 26 (20). – P.6280.		
4. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Молекулярное моделирование активации цефтриаксона в активных центрах пенициллин-связывающих белков 2 // Известия Академии наук. Серия химическая, 2022. – Vol. 5. – P. 915-920 (переводная версия: Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Molecular modeling of ceftriaxone activation in the active sites of penicillin-binding proteins 2. // <i>Russian Chemical Bulletin</i> , 2022. – Vol. 71. – P. 915–920).		
5. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Interplay between the enamine and imine forms of the hydrolyzed imipenem in the active sites of metallo- $\beta$ -lactamases and in water solution // <i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> , 2022. – Vol. 62(24). – P.6519-6529.		
6. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Influence of the Active Site Flexibility on the Efficiency of Substrate Activation in the Active Sites of Bi-Zinc Metallo- $\beta$ -Lactamases // <i>Molecules</i> , 2022. – Vol. 27. – P. 7031.		
7. Krivitskaya A.V., Khrenova M.G. Evolution of Ceftriaxone Resistance of Penicillin-Binding Proteins 2 Revealed by Molecular Modeling // <i>International Journal of Molecular Sciences</i> , 2023. – Vol. 24. – P. 176.		

*Тезисы докладов*

1. Кривицкая А.В., Хренова М.Г., Цирельсон В.Г. Анатомия водородной связи N...N в комплексах метанол-имидазол: влияние заместителей в газовой фазе и растворе. XXVII Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование»;
2. Кривицкая А.В. Процессы гидролиза и ингибирования в активном центре металло-β-лактамазы NDM-1 // Сборник тезисов отчётной конференции аспирантов ФИЦ Биотехнологии РАН: направление подготовки 06.06.01 Биологические науки (21-25 июня 2021 г.) / под ред. В.О. Попова, А.Н. Фёдорова; сост. Е.С. Титова. – М.: ВАШ ФОРМАТ. – 2021. – С. 48-52. (тезисы и устный доклад);
3. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Механизмы реакции гидролиза имипенема карбапенемазами L1 и NDM-1 // XXIX Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Москва, (24-28 января 2022 г.). (устный доклад);
4. Кривицкая А.В. Механизмы реакции гидролиза имипенема металло-β-лактамазы L1 и NDM-1 // IX Всероссийская научная молодежная школа-конференция «Химия, физика, биология: пути интеграции». Москва, (20-22 апреля 2022 г.). (устный доклад);
5. Кривицкая А.В. Механизмы реакции гидролиза имипенема металло-β-лактамазами NDM-1 и L1 // Сборник тезисов отчётной конференции аспирантов ФИЦ Биотехнологии РАН: направление подготовки 06.06.01 Биологические науки (23-30 июня 2022 г.) / под ред. В.О. Попова, А.Н. Фёдорова; сост. Е.С. Титова, С.В. Соловьева. – М.: ВАШ ФОРМАТ. – 2022. – С. 64-68. (тезисы и устный доклад);
6. Кривицкая А.В. Механизм реакции ингибирования пенициллин-связывающего белка 2 из штаммов FA19, 35/02 и H041 *Nisseria Gonorrhoeae* цефтриаксоном. XXII Ежегодная молодежная конференция с международным участием ИБХФ РАН-ВУЗЫ “Биохимическая физика”, 14-16 ноября 2022 г., г. Москва. (устный доклад);
7. Кривицкая А.В. Эволюция механизмов ингибирования пенициллин-связывающих белков бета-лактамами антибиотиками. Школа-конференция для молодых ученых "Суперпатогены - новый цивилизационный вызов", 14-15 ноября 2022 г., г. Сочи. (устный доклад);
8. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Механизм реакции ингибирования пенициллин-связывающих белков цефтриаксоном. ТРИДЦАТАЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ МАТЕМАТИКА. КОМПЬЮТЕР. ОБРАЗОВАНИЕ, МГУ имени М.В. Ломоносова, 23-27 января 2023 г., г. Москва. (постер);
9. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Механизм ингибирования пенициллин-связывающего белка 2 из штаммов FA19, 35/02 и H041 *Nisseria gonorrhoeae* цефтриаксоном. XXXV Зимняя молодёжная научная школа "ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ", 7-10 февраля 2023 г., г. Москва. (постер);
10. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Эволюция молекулярного механизма ингибирования пенициллин-связывающих белков цефтриаксоном. 65-я Всероссийская научная конференция МФТИ. В честь 115-летия Л.Д. Ландау, 3-8 апреля 2023 г., МФТИ, г. Долгопрудный. (устный доклад);
11. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Молекулярные механизмы антибиотикорезистентности, связанные с гидролизом β-лактамов антибиотиков. VII Съезд биофизиков России, 17 -23 апреля 2023 г., Краснодар. (устный доклад);
12. Кривицкая А.В. Саммит разработчиков лекарственных препаратов «Сириус.БИОТЕХ», Федеральная территория «Сириус», 11-13 мая 2023 г. (устный доклад);
13. Кривицкая А.В. Эволюция механизма ингибирования RBP2 из *Neisseria gonorrhoeae* антибиотиком цефтриаксоном // Сборник тезисов отчётной конференции аспирантов ФИЦ Биотехнологии РАН: направление подготовки 06.06.01 Биологические науки (19-21 июня 2023 г.) / под ред. А.М. Камионской, Е.З. Кочиева, Ю.А. Медведева, Н.В. Пименова, М.С. Крицкого; сост. Ю.В. Рагузова, М.В. Костоломова. – М.: ВАШ ФОРМАТ. – 2023. – С. 60-

63. (тезисы и устный доклад); 14. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Уравнение структура-свойство для определения скорости инактивации цефалоспориновых антибиотиков металло-бета-лактамазой L1. I Междисциплинарная всероссийская молодежная научная школа-конференция с международным участием «Молекулярный дизайн биологически активных веществ: биохимические и медицинские аспекты», г. Казань, 18-22 сентября 2023 г. (устный доклад).	
Участие в конкурсах, проектах	
соисполнитель гранта <u>РНФ № 18-74-10056</u>	
Название конкурса, проекта	Отсканированный диплом, сертификат
Рецензии научного руководителя на работы аспиранта	-