


Портфолио аспиранта

	Кривицкая Александра Вячеславовна	
Направление	06.06.01	Биологические науки
Профиль	1.5.4.	Биохимия
Срок обучения	21.09.2020	20.09.2024
Лаборатория (подразделение)	группа молекулярного моделирования	
Научный руководитель	д. ф.-м. н., рук. группы Хренова Мария Григорьевна	
Тема научной работы	Молекулярное моделирование реакционной способности и механизмов ингибирования металло-бета-лактамаз	
Успеваемость		
дисциплина	дата экзамена	оценка
Специальность (биохимия)	-	-
Иностранный язык	26.05.2021	отлично
История и философия науки реферат	23.03.2022	хорошо
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 2: Химия. – 2020. – № 61, – С. 202-207.		
3. 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. – Vol. 26 (7). – P. 2026.		
4. 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 // Molecules. – 2021. – Vol. 26 (20). – P.6280.		
<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 г.) – С.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 г.) – С.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 г.), – С. 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 г.), – С. 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 г.).

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 г.). – С. 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 г.). – С. 54.

8. 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».

9. 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)

10. Кривицкая А.В., Хренова М.Г. Механизмы реакции гидролиза имипенема карбапенемами L1 и NDM-1 // XXIX Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Москва, (24-28 января 2022 г.). (устный доклад)

11. 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)

12. 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)

соисполнитель гранта РНФ № 18-74-10056