

Председателю диссертационного совета
24.2.392.06 на базе ФГБОУ ВО «Саратовский
национальный исследовательский
государственный университет имени
Н.Г. Чернышевского» д.ф.-м.н., профессору,
чл.-корр. РАН В.В. Тучину

Уважаемый Валерий Викторович!

В ответ на Ваш запрос о возможности выступить в качестве официального оппонента по диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук Бокарева Андрея Николаевича на тему «Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами» по специальности 1.3.6. - оптика, которая планируется к защите на диссертационном совете 24.2.392.06, даю свое согласие выступить в качестве официального оппонента и предоставить отзыв на диссертацию в сроки, установленные в п. 23 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г.

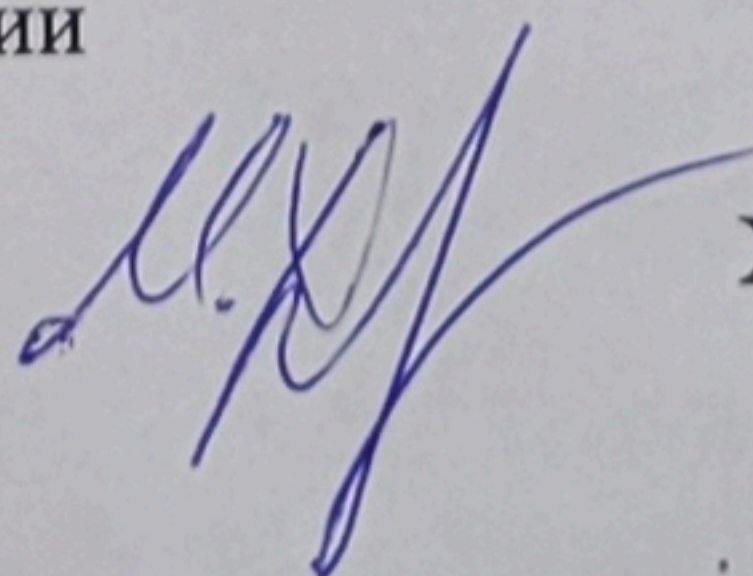
Сведения об оппоненте.

Фамилия Имя Отчество	Хренова Мария Григорьевна
Место работы	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», химический факультет, кафедра физической химии
Должность	профессор
Степень и шифр специальности, по которой была защищена диссертация	Доктор физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия
Звание	Профессор РАН
Почтовый адрес	119991, г. Москва, Ленинские горы 1с3
Телефон	+74959392286
Список основных публикаций по теме диссертации в рецензируемых научных журналах за последние 5 лет (не более 15)	<ol style="list-style-type: none"> 1. A.V. Krivitskaya, M.G. Khrenova, Boronic Acids as Prospective Inhibitors of Metallo-β-Lactamases: Efficient Chemical Reaction in the Enzymatic Active Site Revealed by Molecular Modeling // <i>Molecules</i> 26 (2021) 2026. doi: 10.3390/molecules26072026. 2. O.M. Subach, A.V. Vlaskina, Y.K. Agapova, P.V. Dorovatovskii, A.Y. Nikolaeva, O.I. Ivashkina, V.O. Popov, K.D. Piatkevich, M.G. Khrenova, T.A. Smirnova, K.M. Boyko, F.V. Subach, LSSmScarlet, dCyRFP2s, dCyOFP2s and CRISPRed2s, Genetically Encoded Red Fluorescent

- Proteins with a Large Stokes Shift // *Int. J. Mol. Sci.* 22 (2021), 12887. doi: 10.3390/ijms222312887.
3. **M.G. Khrenova**, A.M. Kulakova, A.V. Nemukhin, Light-Induced Change of Arginine Conformation Modulates the Rate of Adenosine Triphosphate to Cyclic Adenosine Monophosphate Conversion in the Optogenetic System Containing Photoactivated Adenylyl Cyclase // *J. Chem. Inf. Model.* 61 (2021) 1215–1225. doi: 10.1021/acs.jcim.0c01308.
 4. **M.G. Khrenova**, E.S. Bulavko, F.D. Mulashkin, A.V. Nemukhin, Mechanism of Guanosine Triphosphate Hydrolysis by the Visual Proteins Arl3-RP2: Free Energy Reaction Profiles Computed with Ab Initio Type QM/MM Potentials // *Molecules* 26 (2021) 3998–4013. doi: 10.3390/molecules26133998
 5. E.O. Levina, **M.G. Khrenova**, Metallo- β -Lactamases: Influence of the Active Site Structure on the Mechanisms of Antibiotic Resistance and Inhibition // *Biochemistry (Moscow)* 86 (2021) S24–S37. doi: 10.1134/s0006297921140030.
 6. **M.G. Khrenova**, F.D. Mulashkin, A.V. Nemukhin, Modeling Spectral Tuning in Red Fluorescent Proteins Using the Dipole Moment Variation upon Excitation // *J. Chem. Inf. Model.* 61 (2021) 5125–5132. doi: 10.1021/acs.jcim.1c00981.
 7. **M.G. Khrenova**, B.L. Grigorenko, A.V. Nemukhin, Molecular modeling reveals the mechanism of Ran-RanGAP-catalyzed guanosine triphosphate hydrolysis without an arginine finger // *ACS Catalysis* 11(2021) 8985–8998. doi: 10.1021/acscatal.1c00582.
 8. A.M. Kulakova, **M.G. Khrenova**, Molecular mechanism of the cesium and rubidium selective binding to the calix[4]arene revealed by Born–Oppenheimer molecular dynamics simulation and electron density analysis // *Mendeleev Commun.* 31(2021) 185–187. doi: 10.1016/j.mencom.2021.03.013.
 9. **M.G. Khrenova**, A.Yu. Soloveva, T.V. Tikhonova, V.O. Popov, The O to S substitution in urea brings inhibition activity against thiocyanate dehydrogenase // *Mendeleev Commun.* 31 (2021) 373–375. doi: 10.1016/j.mencom.2021.03.013.
 10. D.P. Kapusta, F.D. Mulashkin, **M.G. Khrenova**, Keto–enol tautomerism of the 4,5-dimethyl-2-(2'-hydroxyphenyl)imidazole in water solution: Modeling equilibrium between neutral forms and accurate assignment of the absorption bands // *Int. J. Quantum Chem.* 121 (2021), e26577 doi: 10.1002/qua.26577.

11. **M.G. Khrenova**, E.O. Levina, V.G. Tsirelson, Benchmark studies of hydrogen bond governing reactivity of cephalosporins in L1 metallo- β -lactamase: Efficient and reliable QSPR equations // Int. J. Quantum Chem. 121 (2021) e26451. doi: 10.1002/qua.26451
12. A.K. Bakunova, A.Yu. Nikolaeva, T.V. Rakitina, T.Y. Isaikina, **M.G. Khrenova**, K.M. Boyko, V.O. Popov, E.Yu. Bezudnova, The Uncommon Active Site of D-Amino Acid Transaminase from Haliscomenobacter hydrossis: Biochemical and Structural Insights into the New Enzyme // Molecules 26 (2021) 5053. doi: 10.3390/molecules26165053.
13. E.O. Levina, **M.G. Khrenova**, V.G. Tsirelson, The explicit role of electron exchange in the hydrogen bonded molecular complexes // J. Comput. Chem. 42 (2021) 870-882. doi: 10.1002/jcc.26507.
14. A.V. Gavshina, N.K. Marynich, **M.G. Khrenova**, I.D. Solovyev, A.P. Savitsky, The role of cysteine residues in the allosteric modulation of the chromophore phototransformations of biphotochromic fluorescent protein SAASoti // Sci. Rep. 11 (2021) 24314. doi: 10.1038/s41598-021-03634-9.
15. A.V. Krivitskaya, **M.G. Khrenova**, A.V. Nemukhin, Two Sides of Quantum-Based Modeling of Enzyme-Catalyzed Reactions: Mechanistic and Electronic Structure Aspects of the Hydrolysis by Glutamate Carboxypeptidase // Molecules 26 (2021) 6280. doi: 10.3390/molecules26206280.

Профессор кафедры физической химии
химического факультета МГУ
профессор РАН, д.ф.-м.н.



Хренова М.Г.

Подпись Хреновой М.Г. заверяю:

Ученый секретарь Ученого Совета
химического факультета МГУ
доцент, к.х.н.



Абрамычева Н.Л.