

Сведения о научном руководителе

диссертации Крапивина Владимира Борисовича

«Молекулярное моделирование биохимических реакций нитроксильных радикалов и динитрозильных комплексов железа»

Научный руководитель: Лужков Виктор Борисович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Институт проблем химической физики Российской академии наук, Отдел кинетики химических и биологических процессов

Адрес места работы: пр. акад. Семенова, 1, г. Черноголовка, Московская обл.

Тел. : +74959935707

E-mail: vbl@icp.ac.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – физическая химия за последние 5 лет:

1. V.B. Krapivin, A.S. Mendkovich, V.D. Sen', **V.B. Luzhkov**, Quantum chemical calculations of hydration electrostatics and electrochemical oxidation potential of cyclic nitroxide radicals // Mendeleev Commun. 29 (2019) 77–79. doi: 10.1016/j.mencom.2019.01.026
2. V. B. Krapivin, V.D. Sen', **V. B. Luzhkov**, Quantum chemical calculations of the one-electron oxidation potential of nitroxide spin labels in biologically active compounds // Chem. Phys. 522 (2019) 214–219. doi.org/10.1016/j.chemphys.2019.02.021
3. V.B. Krapivin, **V.B. Luzhkov**, Molecular modelling of fullerene C60 and its amino acid derivatives in aqueous medium // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 525 (2019) 012033.1-6. doi: 10.1088/1757-899X/525/1/012033
4. T.I. Rokitskaya, **V.B. Luzhkov**, G.A. Korshunova, V.N. Tashlitsky, Y.N. Antonenko, Effect of Methyl and Halogen Substituents on the Transmembrane Movement of the Lipophilic Ions // Phys.Chem. Chem.Phys. 21 (2019) 23355–23363. doi:10.1039/c9cp03460a
5. **В.Б. Лужков**, Учет конформационной подвижности в квантово-химических расчетах потенциалов окисления нитроксильных радикалов // Ж. Физ. Хим. 94 (2020) 680–685. doi: 10.31857/S0044453720050155.
6. O.V. Pokidova, **V.B. Luzhkov**, N.S. Emel'yanova, V.B. Krapivin, A.I. Kotelnikov, N.A. Sanina, S.M. Aldoshin, Effect of albumin on the transformation of dinitrosyl iron complexes

with thiourea ligands // Dalton Trans. 49 (2020) 12674-12685, doi.org/10.1039/D0DT02452J

7. T.I. Rokitskaya, E.A. Kotova, **V.B. Luzhkov**, R.S. Kirsanov, E.V. Aleksandrova, G.A. Korshunova, Y.N. Antonenko, Lipophylic ion aromaticity is not important for permeability across lipid mem-branes. // BBA Biomembranes 1863 (2021) 183483. doi.org/10.1016/j.bbamem.2020.183483
8. V.D. Sen', V.A. Golubev, G.V. Shilov, A.V. Chernyak, V.A. Kurmaz, **V.B. Luzhkov**, Oxygen Atom Transfer in the Oxidation of Dimethyl Sulfoxide by Oxoammonium Cations // J. Org. Chem. 86 (2021) 3176–3185. doi.org/10.1021/acs.joc.0c02526
9. В.Б. Крапивин, **В.Б. Лужков**, Молекулярное моделирование конформационной динамики нитроксильных производных хитозана в водном растворе // Известия РАН сер.хим. № 8 (2021) 1523–1532. ISSN 1026_3500.
10. Y. N. Kozyrev, A.S. Mendkovich, V.A. Kokorekin, **V.B. Luzhkov**, A.I. Rusakov, Integrated Study of the Thiocyanate Anion Electrooxidation by Electroanalytical and Computational Methods // J. of the Electrochemical Society 168 (2021) 125501. doi: 10.1149/1945-7111/ac39d4
11. T.I. Rokitskaya, E.V. Aleksandrova, G.A. Korshunova, L.S. Khailova, V.N. Tashlitsky, **V.B. Luzhkov**, Y.N. Antonenko Membrane Permeability of Modified Butyltriphenylphosphonium Cations. // J. Phys. Chem. B 126 (2022) 412–422. doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c08135
12. V.B. Krapivin, V.B. Luzhkov, N.A. Sanina, S.M. Aldoshin, Decomposition of dinitrosyl iron complex with thioformaldehyde ligands in water: reaction mechanisms and the role of chemical hardness of ligands // Mendeleev Commun. 32 (2022) 457–459. doi: 10.1016/j.mencom.2022.07.010.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.3 (МГУ.02.04),

к.х.н., доцент Шилина Марина Ильинична

