

В Диссертационный совет 24.1.172.01 (Д 001.010.01)
при Федеральном государственном бюджетном научном
учреждении «Научно-исследовательский институт
биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»

Сведения

о ведущей организации по диссертации

ИОНОВА Никиты Сергеевича «Разработка информационно-вычислительной платформы для оценки фармакологического потенциала фитокомпонентов лекарственных растений», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. – «Математическая биология, биоинформатика».

Полное наименование организации	Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»
Сокращенное наименование организации	ФИЦ Биотехнологии РАН
Организационно-правовая форма	Федеральные государственные бюджетные учреждения
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Почтовый индекс и адрес организации	119071 Российская Федерация, г. Москва, Ленинский проспект, дом 33, строение 2
Электронная почта организации	info@fbras.ru
Официальный сайт организации	http://fbras.ru
Телефон организации	+7 (495) 954-52-83

Список

основных публикаций сотрудников

1. Makarov V., Salina E., Reynolds R.C., Kyaw Zin P.P., Ekins S. Molecule Property Analyses of Active Compounds for Mycobacterium Tuberculosis, *Journal of Medicinal Chemistry*, 2020. 63(17), 8917-8955. doi: 10.1021/acs.jmedchem.9b02075
2. Khrenova Maria G., Tsirelson Vladimir G., Levina Elena O. Benchmark studies of hydrogen bond governing reactivity of cephalosporins in L1 metallo- β -lactamase: Efficient and reliable QSPR equation. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2020, # e26451, doi: 10.1002/qua.26451.
3. Gawriljuk V., Foil D., Puhl A., Zorn K., Lane T., Riabova O., Makarov V., Godoy A., Oliva G., Ekins S. Development of Machine Learning Models and the Discovery of a New Antiviral Compound Against Yellow Fever Virus. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2021, 61(8), 3804-3813. 10.1021/acs.jcim.1c00460
4. Eugene V. Korotkov, Yulia. M. Suvorova, Anna V. Nezhdanova, Sofia E. Gaidukova, Irina V. Yakovleva, Anastasia M. Kamionskaya, Maria A. Korotkova. Mathematical Algorithm for Identification of Eukaryotic Promoter Sequences. *Symmetry-Basel*. 2021, v. 13, # 6, p. 1-19, Article Number: 917, doi: 10.3390/sym13060917

5. Dmitry P. Kapusta, Fedor D. Mulashkin, Maria 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. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2021, v. 121, # 8, p. 1-7, Article Number: e26577, doi: 10.1002/qua.26577
6. Khrenova M. G., Grigorenko B. L., Nemukhin A. V. Molecular modeling reveals the mechanism of ran-ranGAP-catalyzed guanosine triphosphate hydrolysis without an arginine finger. *ACS Catalysis*. 2021, v. 11, # 15, p. 8 985-8 998, doi: 10.1021/acscatal.1c00582
7. Lane T.R., Urbina F., Rank L., Gerlach J., Riabova O., Lepioshkin A., Kazakova E., Vocat A., Tkachenko V., Cole S., Makarov V., Ekins S. Machine Learning Models for Mycobacterium tuberculosis In Vitro Activity: Prediction and Target Visualization. *Molecular Pharmaceutics*, 2022, 19, 674-689. doi: 10.1021/acs.molpharmaceut.1c00791
8. Bella L. Grigorenko, Igor V. Polyakov, Maria G. Khrenova, Goran Giudetti, Shirin Faraji, Anna I. Krylov, Alexander V. Nemukhin. Multiscale Simulations of the Covalent Inhibition of the SARS-CoV 2 Main Protease: Four Compounds and Three Reaction Mechanisms. *Journal of the American Chemical Society*, 2023, v. 145, p. 13204-13214. doi: 10.1021/jacs.3c02229.
9. Bubnova A.N., Yakovleva I.V., Korotkov E.V., Kamionskaya A.M. In Silico Verification of Predicted Potential Promoter Sequences in the Rice (*Oryza sativa*) Genome. *Plants-Basel*, 2023, v. 12, № 20, # 3573, p. 1-13. doi: 10.3390/plants12203573.
10. Boyko K.M., Khrenova M.G., Nikolaeva A.Y., Dorovatovskii P.V., Vlaskina A.V., Subach O.M., Popov V.O., Subach F.V. Combined structural and computational study of the mRubyFT fluorescent timer locked in its blue form. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, v. 24, № 9, # 7906, p. 1-13. doi: 10.3390/ijms24097906.
11. Andrey Shevtsov, Mikhail Raevskiy, Alexey Stupnikov, Yulia Medvedeva. In Silico Drug Repurposing in Multiple Sclerosis Using scRNA-Seq Data. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, v. 24, № 2, # 985, p. 1-12. doi: 10.3390/ijms24020985.
12. Puhl A.C., Lewicki S.A., Gao Z.G., Pramanik A., Makarov V., Ekins S., Jacobson K.A. Machine Learning-Aided Search for Ligands of P2Y6 and Other P2Y Receptors. *Purinergic Signalling*, 2024, doi: 10.1007/s11302-024-10003-4
13. Tsedilin A., Schmidtke M., Monakhova N., Leneva I., Falynskova I., Khrenova M., Lane T. R., Ekins S., Makarov V. Indole-Core Inhibitors of Influenza A Neuraminidase: Iterative Medicinal Chemistry and Molecular Modeling. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2024, 277, 116768. doi: 10.1016/j.ejmech.2024.116768
14. Mulashkina TI, Kulakova AM, Khrenova MG. Molecular Basis of the Substrate Specificity of Phosphotriesterase from *Pseudomonas diminuta*: A Combined QM/MM MD and Electron Density Study. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2024 Sep 23;64(18):7035-7045. doi: 10.1021/acs.jcim.4c00425.

Ученый секретарь
ФИЦ Биотехнологии РАН

к.б.н.



11.2024

Handwritten signature in blue ink.

Орловский А.Ф.