

Сведения об официальных оппонентах

по диссертации Загрибельного Богдана

«Платформа генеративной химии в моделировании структур потенциальных лекарственных веществ»

1. Ф.И.О.: Свитанько Игорь Валентинович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: нет

Научная специальность: 02.00.03 — Органическая химия

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук

Должность: заведующий лабораторией молекулярного моделирования и
направленного синтеза

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 47

Тел.: +7 (499) 137-87-09

E-mail: svitanko@ioc.ac.ru

Второе место работы: Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Национальный исследовательский
университет «Высшая школа экономики»

Должность: профессор, Факультет химии, Базовая кафедра органической химии
Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

Адрес места работы: 117312, г. Москва, ул. Вавилова, д.7, каб. 216

Тел.: +7 (495) 772-95-90 23530

E-mail: isvitanko@hse.ru

Список основных научных публикаций по специальности и/или проблематике
оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. **Свитанько И.В.**, Пивина Т.С. Молекулярное моделирование в синтетической химии: от статистических методов к квантовой химии и практическим приложениям // *Известия Академии наук. Серия химическая.* – 2024. – Т. 73, № 5. – С. 1093-1108. – EDN CJOISN.
2. Khakimov D.V., **Svitanko I.V.**, Pivina T.S. Computational insight into the crystal structures of cubane and azacubanes // *Journal of Molecular Modeling.* – 2024. – Vol. 30, No. 4. – P. 93. – DOI 10.1007/s00894-024-05891-7. – EDN QWTJJN.
3. Rusina P., Gandalipov E., Abdusheva Ya., Panova M., Burdenkova A., Chaliy V., Brachs M., Stroganov O., Guzueva K., **Svitanko I.**, Shtil A., Novikov F. Imidazole-4-

N-acetamide Derivatives as a Novel Scaffold for Selective Targeting of Cyclin Dependent Kinases // *Cancers*. – 2023. – Vol. 15, No. 15. – P. 3766. – DOI 10.3390/cancers15153766. – EDN BHOCBZ.

4. Medvedev M.G., Stroganov O.V., Dmitrienko A.O., Panova M.V., Lisov A.A., **Svitanko I.V.**, Novikov F.N., Chilov G.G. Reducing false-positive rates in virtual screening via cancellation of systematic errors in the scoring function // *Mendeleev Communications*. – 2022. – Vol. 32, No. 6. – P. 735-738. – DOI 10.1016/j.mencom.2022.11.009. – EDN YCHHJO.
5. Титов И.Ю., Стройлов В.С., Русина П.В., **Свитанько И.В.** Предварительное моделирование как первая стадия направленного органического синтеза // *Успехи химии*. – 2021. – Т. 90, № 7. – С. 831-867. – DOI 10.1070/RCR5012. – EDN XNWEIX.

2. Ф.И.О.: Лагунин Алексей Александрович

Ученая степень: доктор биологических наук

Ученое звание: нет

Академическое звание: профессор РАН

Научная специальность: 03.01.09 – Математическая биология, биоинформатика

Место работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации

Должность: заведующий кафедрой биоинформатики, Институт биомедицины (МБФ)

Адрес места работы: 117513, г. Москва, Островитянова ул., д. 1, стр. 1

Тел.: +7 (495) 434-35-21;

E-mail: lagunin_aa@rsmu.ru

Второе место работы: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича»

Должность: главный научный сотрудник, лаборатория структурно-функционального конструирования лекарств

Адрес места работы: 119121, Россия, г. Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр.8

Тел.: +7 (499) 246-30-29

E-mail: alexey.lagunin@ibmc.msk.ru

Список основных научных публикаций по специальности и/или проблематике

оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. Ivanov S.M., Rudik, A.V., **Lagunin A.A.**, Filimonov D.A., Poroikov V.V. DIGEP-Pred 2.0: A web application for predicting drug-induced cell signaling and gene expression changes // *Molecular Informatics* – 2024. – Vol. 43, № 12 – e202400032 – DOI: 10.1002/minf.202400032
2. Ilyin N.P., Nabiullin A.D., Kozlova A.D., Kupriyanova O.V., Shevyrin V.A., Gloriozova T., Filimonov D., **Lagunin A.**, Galstyan D.S., Kolesnikova T.O., Mor M.S., Efimova E.V., Poroikov V., Yenkoyan K.B., de Abreu M.S., Demin K.A., Kalueff A.V. Chronic Behavioral and Neurochemical Effects of Four Novel N-Benzyl-2-phenylethylamine Derivatives Recently Identified as “Psychoactive” in Adult Zebrafish Screens // *ACS Chemical Neuroscience* – 2024. – Vol. 15, № 10 – P. 2006–2017. – DOI: 10.1021/acschemneuro.4c00017
3. **Lagunin A.A.**, Sezganova A.S., Muraviova E.S., Rudik A.V., Filimonov D.A. BC CLC-Pred: a freely available web-application for quantitative and qualitative predictions of substance cytotoxicity in relation to human breast cancer cell lines // *SAR and QSAR in Environmental Research.* – 2024. – Vol. 35, № 1. – P. 1-9. – DOI: 10.1080/1062936X.2023.2289050
4. Karasev D.A., Sobolev B.N., Filimonov D.A., **Lagunin A.** Prediction of viral protease inhibitors using proteochemometrics approach // *Computational Biology and Chemistry*. – 2024. – Vol. 110. – 108061 – DOI: 10.1016/j.combiolchem.2024.108061
5. Rudik A.V., Dmitriev A.V., **Lagunin A.A.**, Filimonov D.A., Poroikov V.V. MetaTox 2.0: Estimating the Biological Activity Spectra of Drug-like Compounds Taking into Account Probable Biotransformations // *ACS Omega*. – 2023. – Vol. 8, № 48. – P. 45774-45778. – DOI: 10.1021/acsomega.3c06119

3. Ф.И.О.: Латышев Геннадий Владимирович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: нет

Научные специальности: 02.00.03 – Органическая химия, 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Должность: ведущий научный сотрудник, Химический факультет, кафедра органической химии

Адрес места работы: 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Тел.: +7 (495) 939-53-10

E-mail: latyshev@org.chem.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальностям и/или проблематике оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. Parulava M.J., Kotovshchikov Y.N., **Latyshev G.V.**, Sokolova D.V., Lukashev N.V., Beletskaya I.P. A General Route to 3-Thiosubstituted Steroids via Copper-Catalyzed C–S Coupling // *Synthesis*. — 2025. — Vol. 57 — P. 1481–1489. — DOI: 10.1055/a-2520-0317.
2. Galashev R.N., **Latyshev G.V.**, Kotovshchikov Y.N., Lukashev N.V., Beletskaya I.P. Easy access to 5-cyanotriazoles via Pd-catalyzed cyanation of 5-iodotriazoles // *Organic & Biomolecular Chemistry*. — 2025. — Vol. 23 — P. 4725–4729. — DOI: 10.1039/D5OB00356C.
3. Barashkova X.A., Gevondian A.G., **Latyshev G.V.**, Kotovshchikov Yu.N., Bezzubov S.I., Lukashev N.V., Beletskaya I.P. Access to Bicyclo[3.1.0]hexane and Cyclopenta[c]pyrazole Scaffolds via Solvent-Directed Divergent Reactivity of 5-Iodotriazoles // *Organic Letters*. — 2024. — Vol. 26, No. 45. — P. 9625–9630. — DOI 10.1021/acs.orglett.4c03082.
4. Barashkova X.A., Parulava M.J., Kotovshchikov Y.N., **Latyshev G.V.**, Lukashev N.V., Beletskaya I.P. Alumina-promoted cu-catalyzed hydroboration of alkynes // *Synthesis*. — 2024. — Vol. 56 — P. 1498–1504. — DOI: 10.1055/a-2236-8874.
5. Barashkova X.A., **Latyshev G.V.**, Kotovshchikov Y.N., Lukashev N.V., Beletskaya I.P. Recent Catalytic Routes to 3-Azabicyclo[3.1.0]hexane Derivatives // *Russian Journal of Organic Chemistry*. — 2024. — Vol. 60, No. 3. — P. 359–386. — DOI 10.1134/S1070428024030011.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.7,

к.х.н. Н.А. Синикова

подпись, печать

07.10.2025