

**Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Фоминой Анастасии Дмитриевны**

«Систематический ансамблевый докинг потенциальных лигандов главной протеазы
SARS-CoV-2 и белка NS1 флавивирусов»

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 (№ 44)

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. Timofeev Y.V., Mrasov A.M., Panova M.V., Novikov F.N., **Svitanko I.V.** How to stop worrying and love multiple citation experimental data // *Mendeleev Communications*. 2025. Vol. 35. No. 2. P. 224–227. doi: 10.71267/mencom.7710
2. Pivina T.S., **Svitanko I.V.** Molecular modeling in synthesis: from statistical methods to quantum chemistry and practical applications // *Russian Chemical Bulletin*. 2024. Vol. 73. No. 5. P. 1093–1108. doi: 10.1007/s11172-024-4226-6
3. Rusina P., Gandalipov E., Abdusheva Ya., Panova M., Burdenkova A., Chaliy V., Brachs M., Stroganov O., Guzeeva 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. Article 3766. doi: 10.3390/cancers15153766

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
5. **Svitanko I.**, Stroylov V. Computational identification of disulfiram and neratinib as putative SARS-CoV-2 main protease inhibitors // *Mendeleev Communications*. 2020. Vol. 30. No. 4. P. 419–420. doi: 10.1016/j.mencom.2020.07.004

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 им. 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., Glorizova T., Filimonov D., **Lagunin A.**, Galstyan D.S., Kolesnikova T.O., Mor M.S., Efimova E.V., Poroikov V., Yenkovyan 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/acscchemneuro.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.compbiolchem.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.: Хренова Мария Григорьевна

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: нет

Академическое звание: профессор РАН

Научная специальность: 02.00.17 – Математическая и квантовая химия

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

Должность: профессор, Химический факультет, кафедра физической химии

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

Тел.: +7 (495) 939-48-40

E-mail: khrenovamg@my.msu.ru

Второе место работы: Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»

Должность: ведущий научный сотрудник, Институт биохимии им. А.Н. Баха

Адрес места работы: 119071, г. Москва, Ленинский проспект, д.33, стр. 2

Тел.: +7 (495) 939-48-40

E-mail: khrenovamg@my.msu.ru

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

1. Kulakova A.M., **Khrenova M.G.**, Zvereva M.I., Polyakov I.V. Domain Mobility in the ORF2p Complex Revealed by Molecular Dynamics Simulations and Big Data Analysis // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2025. – Vol. 26, No. 1. – P. 73. – DOI 10.3390/ijms26010073.
2. Мулашкина Т.И., Леонова М.С., **Хренова М.Г.** Конформационная динамика фермент-субстратного комплекса протеинкиназы А с псевдосубстратом SP20 и аденозинтрифосфатом // *Биомедицинская химия*. – 2024. – Т. 70, № 6. – С. 421-427. – DOI 10.18097/PBMC20247006421.
3. Grigoryeva M.A., **Khrenova M.G.**, Subach M.F., Voevodin V.V., Zvereva M.I. Tool and Algorithm for the Determination of Aptamers in Nanopore Sequencing Data: AptaLong // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. – 2024. – Vol. 11, No. 3. – P. 93-106. – DOI 10.14529/jsfi240306.
4. Stepanyuk R.A., Polyakov I.V., Kulakova A.M., Marchenko E.I., **Khrenova M.G.** Towards machine learning prediction of the fluorescent protein absorption spectra // *Mendeleev Communications*. – 2024. – Vol. 34, No. 6. – P. 788-791. – DOI 10.1016/j.mencom.2024.10.007.
5. Grigorenko V.G., Krivitskaya A.V., **Khrenova M.G.**, Rubtsova M.Yu., Presnova G.V., Andreeva I.P., Serova O.V., Egorov A.M. Saturation Mutagenesis and Molecular Modeling: The Impact of Methionine 182 Substitutions on the Stability of β -Lactamase TEM-1 // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2024. – Vol. 25, No. 14. – P. 7691. – DOI 10.3390/ijms25147691.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.7,

к.х.н. Н.А. Синикова

подпись, печать

05.09.2025