

Сведения о научных руководителях

по диссертации Загрибельного Богдана

«Платформа генеративной химии в моделировании структур потенциальных лекарственных веществ»

1. Научный руководитель: Палюлин Владимир Александрович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

Научная специальность: 02.00.03 - Органическая химия

Должность: ведущий научный сотрудник кафедры медицинской химии и тонкого органического синтеза, Химический факультет;

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

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет

Тел.: +7 (495) 939-39-69

E-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

Второе место работы:

Должность: ведущий научный сотрудник научно-образовательного центра медицинской химии Отдела медицинской и биологической химии, Институт физиологически активных веществ;

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук.

Адрес места работы: 142432, Московская область, г. Черноголовка, Северный проезд, дом 1, ИФAB РАН

Тел.: +7 (496) 524-26-50

E-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальностям 1.4.16. Медицинская химия (химические науки), 1.4.3. Органическая химия (химические науки) за последние 5 лет:

1. Makhaeva G.F., Grishchenko M.V., Kovaleva N.V., Boltneva N.P., Rudakova E.V., Astakhova T.Y., Timokhina E.N., Pronkin P.G., Lushchekina S.V., Khudina O.G., Zhilina E.F., Shchegolkov E.V., Lapshina M.A., Dubrovskaya E.S., Radchenko E.V., **Palyulin V.A.**, Burgart Ya.V., Saloutin V.I., Charushin V.N., Richardson R.J. et al. Conjugates of amiridine and salicylic derivatives as promising multifunctional CNS agents for potential treatment of Alzheimer's disease

- // *Archiv der Pharmazie*. – 2025. – Vol. 358, No. 1. – DOI 10.1002/ardp.202400819. – EDN UFRVHV.
2. Kalashnikova A.A., Toibazarova A.B., Artyushin O.I., Anikina L.V., Globa A.A., Klemenkova Z.S., Andreev M.V., Radchenko E.V., **Palyulin V.A.**, Aleksandrova Yu.R., Syzdykbayev M.I., Appazov N.O., Chubarev V.N., Neganova M.E., Brel V.K. Design of New Daunorubicin Derivatives with High Cytotoxic Potential // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2025. – Vol. 26, No. 3. – P. 1270. – DOI 10.3390/ijms26031270. – EDN ANTTIS.
 3. Matthews Ja., Veremeeva P.N., Golubeva E.A., Lavrov M.I., Radchenko E.V., Topchiy M.A., Zamoyski V.L., Grigoriev V.V., **Palyulin V.A.** Novel AMPA receptor allosteric modulators of bis(pyrimidine) series: synthesis and SAR evaluation // *Mendeleev Communications*. – 2024. – Vol. 34, No. 1. – P. 8-10. – DOI 10.1016/j.mencom.2024.01.002. – EDN IPVNZB.
 4. Vasyankin A.V., Panteleev S.V., Steshin I.S., Shirokova E.A., Rozhkov A.V., Livshits G.D., Radchenko E.V., Ignatov S.K., **Palyulin V.A.** Temperature-Induced Restructuring of Mycolic Acid Bilayers Modeling the Mycobacterium tuberculosis Outer Membrane: A Molecular Dynamics Study // *Molecules*. – 2024. – Vol. 29, No. 3. – P. 696. – DOI 10.3390/molecules29030696. – EDN QHVOAI.
 5. Pisarev S.A., Golubeva E.A., **Palyulin V.A.** Ab Initio Conformational Analysis of 3,7-Diacetyl-3,7-Diazabicyclo[3.3.1]Nonanes // *Natural Product Communications*. – 2024. – Vol. 19, No. 3. – DOI 10.1177/1934578x241239199. – EDN AEBMUY.
 6. Фомина А.Д., **Палюлин В.А.**, Осолодкин Д.И. Моделирование структуры белка NS1 ортофлавириусов по гомологии для виртуального скрининга потенциальных лигандов // *Биомедицинская химия*. – 2024. – Т. 70, № 6. – С. 456-468. – DOI 10.18097/PBMC20247006456. – EDN PSYRQY.
 7. Golubeva E.A., Lavrov M.I., Radchenko E.V., **Palyulin V.A.** Diversity of AMPA Receptor Ligands: Chemotypes, Binding Modes, Mechanisms of Action, and Therapeutic Effects // *Biomolecules*. – 2023. – Vol. 13, No. 1. – P. 56. – DOI 10.3390/biom13010056. – EDN VGVGTGA.
 8. Ivanov N.N., Shulga D.A., **Palyulin V.A.** Decomposition of Small Molecules for Fragment-Based Drug Design / N. N. Ivanov, D. A. Shulga, V. A. Palyulin // *Biophysica*. – 2023. – Vol. 3, No. 2. – P. 362-372. – DOI 10.3390/biophysica3020024. – EDN IKOEIV.
 9. Милаева Е.Р., Шпаковский Д.Б., Радченко Е.В., **Палюлин В.А.**, Бабков Д.А., Борисов А.В., Додохова М.А., Сафроненко А.В., Котиева И.М., Спасов А.А. Оловоорганическое соединение - ингибитор образования оксида азота(II) // *Известия Академии наук. Серия химическая*. – 2022. – Т. 71, № 12. – С. 2605-2611. – EDN PFISDK.
 10. Veremeeva P.N., Zaborova O.V., Grishina I.V., Makeev D.V., Timoshenko V.A., Palyulin V.A. Stimulus-sensitive liposomal delivery system based on new 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane

derivatives // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. – 2021. – Vol. 39. – P. 127871. – DOI 10.1016/j.bmcl.2021.127871. – EDN SCHZPV.

11. Pisarev S.A., **Palyulin V.A.** Conformational effects of 1,5,9-substitution in symmetric bicyclo[3.3.1]nonane analogues // *Mendeleev Communications*. – 2021. – Vol. 31, No. 5. – P. 612-614. – DOI 10.1016/j.mencom.2021.09.007. – EDN JFSYBR.

2. Научный руководитель: Иваненков Ян Андреевич

Ученая степень: кандидат биологических наук

Научная специальность: 03.01.04 - Биохимия

Должность: ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией медицинской химии и хемоинформатики, Центр фундаментальных и прикладных исследований (ЦФПИ);

Место работы: Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»).

Адрес места работы: 127030, г. Москва, ул. Суцешская, д.22

Тел.: +7 (499) 978-78-03

E-mail: yaivanenkov@vniia.ru

Второе место работы:

Должность: ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией медицинской химии и компьютерного моделирования, Центр инновационных радиологических и регенеративных технологий;

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный медицинский исследовательский центр радиологии» Министерства здравоохранения Российской Федерации (ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России).

Адрес места работы: 125284, г. Москва, 2-й Боткинский проезд, д. 3

Тел.: +7 (495) 150-11-22

E-mail: mail@nmicr.ru

Список основных научных публикаций по специальностям 1.4.16. Медицинская химия (химические науки), 1.4.3. Органическая химия (химические науки) за последние 5 лет:

1. **Ivanenkov Ya.A.**, Malyshev A.S., Terentiev V.A., Korzhenevskaya A.A., Evteev S.A., Vatsadze S.Z., Medved'ko A.V., Shegai P.V., Kaprin A.D. Small molecule ATM inhibitors as potential cancer therapy: a patent review (2003–present) // *Expert Opinion on Therapeutic Patents*. – 2025. – Vol. 35, No. 2. – P. 111-136. – DOI 10.1080/13543776.2024.2446228. – EDN JIKXEO.

2. **Ivanenkov Ya.A.**, Evteev S.A., Malyshev A.S., Terentiev V.A., Bezrukov D.S., Ereshchenko A.V., Korzhenevskaya A.A., Zagribelnyy B.A., Shegai P.V., Kaprin A.D. AlphaFold for a medicinal

- chemist: tool or toy? // *Russian Chemical Reviews*. – 2024. – Vol. 93, No. 3. – P. RCR5107. – DOI 10.59761/RCR5107. – EDN HPANLQ.
3. Aladinskiy V., Kruse Ch., Qin L., Babin E., Fan Ya., Andreev G., Zhao H., Fu Ya., Zhang M., **Ivanenkov Ya.**, Aliper A., Zhavoronkov A., Ren F. Discovery of Bis-imidazolecarboxamide Derivatives as Novel, Potent, and Selective TNIK Inhibitors for the Treatment of Idiopathic Pulmonary Fibrosis // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2024. – Vol. 67, No. 21. – P. 19121-19142. – DOI 10.1021/acs.jmedchem.4c01580. – EDN VPJZIW.
 4. Evteev S., **Ivanenkov Ya.**, Semenov I., Malkov M., Mazaleva O., Bodunov A., Bezrukov D., Sidorenko D., Terentiev V., Malyshev A., Zagribelnyy B., Korzhenevskaya A., Aliper A., Zhavoronkov A. Quantum-assisted fragment-based automated structure generator (QFASG) for small molecule design: an in vitro study // *Frontiers in Chemistry*. – 2024. – Vol. 12. – DOI 10.3389/fchem.2024.1382512. – EDN BPJLMG.
 5. Uspenskaya A.A., Nimenko E.A., Shafikov R.R., Zyk N.Y., Evteev S.A., Dashkova N.S., **Ivanenkov Ya.A.**, Majouga A.G., Skvortsov D.A., Garanina A.S., Beloglazkina E.K., Machulkin A.E. Optimization of the dipeptide motifs in the PSMA ligands linker structure: synthesis and in vitro evaluation // *Medicinal Chemistry Research*. – 2023. – Vol. 32, No. 1. – P. 32-37. – DOI 10.1007/s00044-022-03002-w. – EDN TOBBDC.
 6. **Ivanenkov Ya.A.**, Kukushkin M.E., Beloglazkina A.A., Shafikov R.R., Barashkin A.A., Ayginin A.A., Serebryakova M.S., Majouga A.G., Skvortsov D.A., Tafeenko V.A., Beloglazkina E.K. Synthesis and Biological Evaluation of Novel Dispiro-Indolinones with Anticancer Activity // *Molecules*. – 2023. – Vol. 28, No. 3. – P. 1325. – DOI 10.3390/molecules28031325. – EDN WZMWEA.
 7. **Ivanenkov Ya.A.**, Polykovskiy D., Bezrukov D., Zagribelnyy B., Aladinskiy V., Kamyra P., Aliper A., Ren F., Zhavoronkov A. Chemistry42: An AI-Driven Platform for Molecular Design and Optimization // *Journal of Chemical Information and Modeling*. – 2023. – Vol. 63, No. 3. – P. 695-701. – DOI 10.1021/acs.jcim.2c01191. – EDN DOBCMI.
 8. Evteev S.A., Ereshchenko A.V., **Ivanenkov Ya.A.** SiteRadar: Utilizing Graph Machine Learning for Precise Mapping of Protein–Ligand-Binding Sites // *Journal of Chemical Information and Modeling*. – 2023. – Vol. 63, No. 4. – P. 1124-1132. – DOI 10.1021/acs.jcim.2c01413. – EDN WTCQQC.
 9. Zyk N.Y., Ber A.P., Nimenko E.A., Shafikov R.R., Petrov S.A., Uspenskaya A.A., Dashkova N.S., **Ivanenkov Ya.A.**, Skvortsov D.A., Beloglazkina E.K., Majouga A.G., Machulkin A.E., Evteev S.A. Synthesis and initial in vitro evaluation of PSMA-targeting ligands with a modified aromatic moiety at the lysine ϵ -nitrogen atom // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. – 2022. – Vol. 71. – P. 128840. – DOI 10.1016/j.bmcl.2022.128840. – EDN YWTYFY.

10. Лукьянов Д.А., Буев В.С., **Иваненков Ян.А.**, Карцев В.Г., Скворцов Д.А., Остерман И.А., Сергиев П.В. Новый ингибитор трансляции - производное имидазола // *Acta Naturae (русскоязычная версия)*. – 2022. – Т. 14, № 2. – С. 71-77. – DOI 10.32607/actanaturae.11654. – EDN UFLFVB.

11. **Ivanenkov Y.A.**, Yu. Filyaeva K., Matniyazov R.T., Baymiev A.K., Baymiev An.Kh., Vladimirova A.A., Yamidanov R.S., Zileeva Z.R., Zainullina L.F., Vakhitova J.V., Terentiev V.A., Marina V.I., Osterman I.A., Dontsova O.A., Mavzyutov A.R., Kartsev V.G., Bezrukov D.S. Antibacterial activity of noscapine analogs // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. – 2021. – Vol. 43. – P. 128055. – DOI 10.1016/j.bmcl.2021.128055. – EDN BOTXRW.

30.09.2025

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.014.7,
к.х.н.

подпись, печать

Н.А. Синикова