

Сведения о научных руководителях

по диссертации Фоминой Анастасии Дмитриевны

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

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, ИФАВ РАН

Тел.: +7 (496) 524-26-50

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

Список основных научных публикаций

по специальности 1.4.16. Медицинская 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., Pantelev 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: Осолодкин Дмитрий Иванович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: нет

Научная специальность: 02.00.03 – Органическая химия, 02.00.16 – Медицинская химия

Должность: заведующий лабораторией противовирусных лекарственных средств;

Место работы: Федеральное государственное автономное научное учреждение «Федеральный научный центр исследований и разработки иммунобиологических препаратов им. М.П. Чумакова РАН» (Институт полиомиелита).

Адрес места работы: 108819, г. Москва, поселение Московский, посёлок Института полиомиелита, домовладение 8, корпус 1

Тел.: +7 (495) 841-02-02

E-mail: osolodkin_di@chumakovs.su

Второе место работы:

Должность: доцент кафедры организации и технологии производства иммунобиологических препаратов, Институт трансляционной медицины и биотехнологии;

Место работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет).

Адрес места работы: 119048, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2

Тел.: +7 (915) 006-70-15

E-mail: osolodkin_d_i@staff.sechenov.ru

Список основных научных публикаций

по специальности 1.4.16. Медицинская химия (химические науки) за последние 5 лет:

1. Zenchenko A.A., Drenichev M.S., Khvatov E.V., Uvarova V.I., Goryashchenko A.S., Frolenko V.S., Karpova E.V., Kozlovskaya L.I., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A., Mikhailov S.N., Oslovsky V.E. Elongation of N6-benzyladenosine scaffold via Pd-catalyzed C–C bond formation leads to derivatives with antitumor activity // *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. – 2024. – Vol. 98. – P. 117552. – DOI 10.1016/j.bmc.2023.117552. – EDN BACWZK.
2. Zefirov N.A., Khvatov E.V., Nurieva E.V., Esaulkova Ya.L., Volobueva A.S., Zarubaev V.V., Goryashchenko A.S., Yatsenko D.O., Uvarova V.I., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A., Zefirova O.N. Rimantadine derivatives with antiviral activity against flaviviruses and rimantadine-resistant strain of influenza A virus // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – Vol. 73, No. 6. – P. 1801-1810. – DOI 10.1007/s11172-024-4297-4. – EDN LTBIAQ.
3. Фомина А.Д., Палюлин В.А., **Осолодкин Д.И.** Моделирование структуры белка NS1 ортофлавиринов по гомологии для виртуального скрининга потенциальных лигандов // *Биомедицинская химия*. – 2024. – Т. 70, № 6. – С. 456-468. – DOI 10.18097/PBMC20247006456. – EDN PSYRQY.

4. **Osolodkin D.I.**, Kozlovskaya L.I., Iusupov I.R., [et al.] Phenotypic assessment of antiviral activity for spiro-annulated oxepanes and azepenes // *Chemical Biology and Drug Design*. – 2024. – Vol. 103, No. 5. – DOI 10.1111/cbdd.14553. – EDN NJDHKB.
5. Fomina A.D., Uvarova V.I., Kozlovskaya L.I., Palyulin V.A., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A. Ensemble docking based virtual screening of SARS-CoV-2 main protease inhibitors // *Molecular Informatics*. – 2024. – Vol. 43, No. 8. – DOI 10.1002/minf.202300279. – EDN APAGEM.
6. Moiseenko A., Zhang Y., Vorovitch M.F., Ivanova A.L., Liu Zh., **Osolodkin D.I.**, Egorov A.M., Ishmukhametov A.A., Sokolova O.S. Structural diversity of tick-borne encephalitis virus particles in the inactivated vaccine based on strain Sofjin // *Emerging Microbes and Infections*. – 2024. – Vol. 13, No. 1. – DOI 10.1080/22221751.2023.2290833. – EDN LGSLQJ.
7. Pichkur E.B., Vorovitch M.F., Ivanova A.L., Protopopova E.V., Loktev V.B., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A., Samygina V.R. The structure of inactivated mature tick-borne encephalitis virus at 3.0 Å resolution // *Emerging Microbes and Infections*. – 2024. – Vol. 13, No. 1. – DOI 10.1080/22221751.2024.2313849. – EDN QTFLPO.
8. Sedenkova K.N., Sazonov A.S., Vasilenko D.A., Andriasov K.S., Eremenko M.G., Grishin Yu.K., Khvatov E.V., Goryashchenko A.S., Uvarova V.I., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A., Averina E.B. 3-[N,N-Bis(sulfonyl)amino]isoxazolines with Spiro-Annulated or 1,2-Annulated Cyclooctane Rings Inhibit Reproduction of Tick-Borne Encephalitis, Yellow Fever, and West Nile Viruses // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – Vol. 24, No. 13. – P. 10758. – DOI 10.3390/ijms241310758. – EDN WPPVXR.
9. Moiseenko A.V., Bagrov D.V., Vorovitch M.F., Uvarova V.I., Veselov M.M., Kashchenko A.V., Ivanova A.L., **Osolodkin D.I.**, Egorov A.M., Ishmukhametov A.A., Shaitan K.V., Sokolova O.S. Size Distribution of Inactivated Tick-Borne Encephalitis Virus Particles Revealed by a Comprehensive Physicochemical Approach // *Biomedicines*. – 2022. – Vol. 10, No. 10. – P. 2478. – DOI 10.3390/biomedicines10102478. – EDN GRVCML.
10. Zakharova M.Y., Kaliberda E.N., Kurbatskaia I.N., Smirnov I.V., Knorre V.D., Gabibov A.G., Kuznetsova A.A., Bulygin A.A., Fedorova O.S., Kuznetsov N.A., Uvarova V.I., Fomina A.D., Kozlovskaya L.I., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A., Egorov A.M., Varnek A. Pre-Steady-State Kinetics of the SARS-CoV-2 Main Protease as a Powerful Tool for Antiviral Drug // *Frontiers in Pharmacology*. – 2021. – Vol. 12, No. 4. – P. 773198. – DOI 10.3389/fphar.2021.773198. – EDN UCTNDK.
11. Kozlovskaya L.I., Volok V.P., **Osolodkin D.I.**, Ishmukhametov A.A., Shtro A.A., Nikolaeva Y.V., Chistov A.A., Jegorov A.V., Korshun V.A., Aralov A.V., Matyugina E.S., Belyaev E.S., Snoeck R., Andrei G. Phenoxazine nucleoside derivatives with a multiple activity against RNA and DNA viruses // *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2021. – Vol. 220. – P. 113467. – DOI 10.1016/j.ejmech.2021.113467. – EDN ODUUOJ.

28.07.2025

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.014.7,

к.х.н.

подпись, печать

Н.А. Синикова