

СВЕДЕНИЯ об официальном оппоненте (Согласие на оппонирование)

Я, Поройков Владимир Васильевич,
(Фамилия, имя, отчество)

согласен быть официальным оппонентом

Борисевич Софии Станиславовны
(Фамилия, имя, отчество)

по кандидатской / докторской (подчеркнуть) диссертации на тему:

«Алгоритм описания механизма противовирусной активности ингибиторов мембранных вирусных белков методами молекулярного моделирования»

по специальности 1.4.16. Медицинская химия

О себе сообщаю:

ученая степень доктор биологических наук

шифр и наименование специальности 14.00.25 - Фармакология

ученое звание - профессор (биохимия), профессор (математическая биология, биоинформатика), член-корреспондент РАН (медицинская биоинформатика)

должность - главный научный сотрудник, заведующий отделом биоинформатики и лабораторией структурно-функционального конструирования лекарств

место и адрес работы (постоянной) Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича», 119121, Россия, г. Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр.8

место и адрес работы (по совместительству) - нет

Я согласен на включение и дальнейшую обработку моих персональных данных, необходимых для процедуры защиты диссертации соискателя, исходя из нормативных документов Правительства РФ, Минобрнауки России и ВАК, в том числе на размещение их в сети Интернет на сайте НИОХ СО РАН, на сайте ВАК, в единой информационной системе.

Перечень опубликованных работ по специальности оппонируемой диссертации (за последние 5 лет):

1. Bitencourt-Ferreira G., Villarreal M.A., Quiroga R., Biziukova N., **Poroikov V.**, Tarasova O., de Azevedo Junior W.F. Exploring Scoring Function Space: Developing Computational Models for Drug Discovery. Current Medicinal Chemistry, 2023. Published on: 08 June, 2023. DOI: 10.2174/0929867330666230321103731. Epub ahead of print.
2. Schimunek J., Seidl P., Elez K., Hempel T., Le T., Noé F., Olsson S., Raich L., Winter R., Gokcan H., Gusev F., Gutkin E.M., Isayev O., Kurnikova M.G., Narangoda C.H., Zubatyuk R., Bosko I.P., Furs K.V., Karpenko A.D., Kornoushenko Y.V., Shulda M., Yushkevich A., Benabderrahmane M.B., Bousquet-Melou P., Bureau R., Charton B., Cirou B.C., Gil G., Allen W.J., Sirimulla S., Watowich S., Antonopoulos N.A., Epitropakis N.E., Krasoulis A.K., Pitsikalis V.P., Theodorakis S.T., Kozlovskii I., Maliutin A., Medvedev A., Popov P., Zaretckii M., Eghbal-Zadeh H., Halmich C., Hochreiter S., Mayr A., Ruch P., Widrich M., Berenger F., Kumar A., Yamanishi Y., Zhang K.Y.J., Bengio E., Bengio Y., Jain M.J., Korablyov M., Liu C.H., Marcou G., Glaab E., Barnsley K., Iyengar S.M., Ondrechen M.J., Haupt V.J., Kaiser F., Schroeder M., Pugliese L., Albani S., Athanasiou C., Beccari A., Carloni P., D'Arrigo G., Gianquinto E., Goßen J., Hanke A., Joseph B.P., Kokh D.B., Kovachka S., Manelfi C., Mukherjee G., Muñoz-Chicharro A., Musiani F., Nunes-Alves A., Paiardi G., Rossetti G., Sadiq S.K., Spyraakis F., Talarico C., Tsengenes A., Wade R.C., Copeland C., Gaiser J., Olson D.R., Roy A., Venkatraman V., Wheeler T.J., Arthanari H., Blaschitz K., Cesugli M., Durmaz V., Fackeldey K., Fischer P.D., Gorgulla C., Gruber C., Gruber K., Hetmann M., Kinney J.E., Padmanabha Das K.M., Pandita S., Singh A., Steinkellner G., Tesseyre G., Wagner G., Wang

- Z.F., Yust .R.J., Druzhilovskiy D.S., Filimonov D.A., Pogodin P.V., **Poroikov V.**, Rudik A.V., Stolbov L.A., Veselovsky A.V., De Rosa M., De Simone G., Gulotta M.R., Lombino J., Mekni N., Perricone U., Casini A., Embree A., Gordon D.B., Lei D., Pratt K., Voigt C.A., Chen K.Y., Jacob Y., Krischuns T., Lafaye P., Zettor A., Rodríguez M.L., White K.M., Fearon D., Von Delft F., Walsh M.A., Horvath D., Brooks C.L. 3rd, Falsafi B., Ford B., García-Sastre A., Yup Lee S., Naffakh N., Varnek A., Klambauer G., Hermans T.M. A community effort in SARS-CoV-2 drug discovery. *Molecular Informatics*, 2024, 43, e202300262. DOI: 10.1002/minf.202300262.
3. Pikalyova K., Orlov A., Lin A., Tarasova O., Marcou G., Horvath D., **Poroikov V.**, Varnek A. HIV-1 drug resistance profiling using amino acid sequence space cartography. *Bioinformatics*, 2022, 38 (8), 2307-2314.
 4. Tarasova O., **Poroikov V.** Machine learning in discovery of new antivirals and optimization of viral infections therapy. *Current Medicinal Chemistry*, 2021, 28, 7840-7861.
 5. Muratov E.N., Amaro R., Andrade C.H., Brown N., Ekins S., Fourches D., Isayev O., Kozakov D., Medina-Franco J., Merz K.M., Oprea T.I., **Poroikov V.**, Schneider G., Todd M.H., Varnek A., Winkler D.A., Zakharov A., Cherkasov A., Tropsha A. A critical overview of computational approaches employed for COVID-19 drug discovery. *Chemical Society Reviews*, 2021, 50 (16), 9121-9151.
 6. Ionov N., Pogodin P., **Poroikov V.** Assessing the Prediction Quality of the Anti-SARS-CoV-2 Activity Using the D3Targets-2019-nCoV Web Service. *Biomedical Chemistry: Research and Methods*, 2020, 3 (4), e00140.
 7. Druzhilovskiy D.S., Stolbov L.A., Savosina P.I., Pogodin P.V., Filimonov D.A., Veselovsky A.V., Stefanisko K., Tarasova N.I., Nicklaus M.C., **Poroikov V.V.** Computational approaches to identify a hidden pharmacological potential in large chemical libraries. *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 2020, 7 (3), 57-76.
 8. Savosina P.I., Druzhilovskiy D.S., **Poroikov V.V.** COVID-19: Analysis of drug repositioning practice. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 2021, 54 (10), 989-996.
 9. **Поройков В.В.** Компьютерное конструирование лекарств: от поиска новых фармакологических веществ до системной фармакологии. *Биомедицинская химия*, 2020, 66 (1), 30-41.
 10. Stolbov L., Druzhilovskiy D., Rudik A., Filimonov D., **Poroikov V.**, Nicklaus M. AntiHIV-Pred: Web-resource for in silico prediction of anti-HIV/AIDS activity. *Bioinformatics*, 2020, 36 (3), 978-979.
 11. Stolbov L.A., Druzhilovskiy D.S., Filimonov D.A., Nicklaus M.C., **Poroikov V.V.** (Q)SAR models of HIV-1 proteins inhibition by drug-like compounds. *Molecules*, 2020, 25, 87.
 12. Савосина П.И., Столбов Л.А., Дружиловский Д.С., Филимонов Д.А., Никлаус М., **Поройков В.В.** Поиск новых антиретровирусных соединений в химическом пространстве “больших данных” библиотеки SAVI. *Биомедицинская химия*, 2019, 65 (2), 73-79.



19 февраля 2024 г.
(дата)

(подпись)