



**МОСКОВСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА
(МГУ)**

Ленинские горы, Москва,
ГСП-1, 119991
Телефон: +7(495) 939-10-00
Факс: +7(495) 939-01-26

20.02.2024 № 146-24/015-03
На № _____

Ученому секретарю
диссертационного совета № 24.1.192.02
на базе НИОХ СО РАН
д.х.н. Лузиной О.А.

**СОГЛАСИЕ
ведущей организации**

В ответ на Ваш запрос № 15326-45-11/133 от 14.02.2024 г., Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова» дает согласие выступить в качестве ведущей организации и предоставить отзыв в диссертационный совет № 24.1.192.02 отзыв на диссертацию Борисевич Софии Станиславовны, представленную на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.16 «Медицинская химия (химические науки)» на тему: «Алгоритм описания механизма противовирусной активности ингибиторов мембранных вирусных белков методами молекулярного моделирования».

Приложение 1. Сведения о ведущей организации и лице, составившем отзыв ведущей организации, в 1 экз.

Проректор Федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Московский
государственный университет имени
М.В.Ломоносова»

А.А. Федянин
«до» _____

В диссертационный совет №24.1.192.02
на базе ФГБУН «Новосибирский институт
органической химии им. Н.Н. Ворожцова»
Сибирского отделения Российской
академии наук (НПОХ СО РАН)

**Сведения
о ведущей организации**

по диссертации БОРИСЕВИЧ Софии Станиславовны
«Алгоритм описания механизма противовирусной активности ингибиторов мембранных
вирусных белков методами молекулярного моделирования», представленной на соискание
ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.16 «Медицинская химия
(химические науки)»

Полное наименование ведущей организации	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Сокращенное наименование ведущей организации	МГУ имени М.В. Ломоносова
Ректор организации	д.ф.-м.н., профессор, академик РАН Садовничий Виктор Антонович
Лицо, утверждающее отзыв ведущей организации	д.ф.-м.н. Федянин Андрей Анатольевич
Почтовый индекс и адрес организации	Российская Федерация, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1
Лица, составляющие отзыв ведущей организации	д.х.н., проф. Милаева Елена Рудольфовна к.х.н., с.н.с. Палюлин Владимир Александрович
Адрес электронной почты лица, составляющего отзыв	vap@qsar.chem.msu.ru
Телефон организации	+7(495)939-10-00
Адрес электронной почты организации	info@rector.msu.ru
Адрес официального сайта в сети «Интернет»	www.msu.ru

**Список основных публикаций сотрудников ведущей организации по теме диссертации
в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)**

1. 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, 13 (1), 56. <https://doi.org/10.3390/biom13010056>
2. Radchenko E.V., Antonyan G.V., Ignatov S.K., Palyulin V.A. Machine learning prediction of mycobacterial cell wall permeability of drugs and drug-like compounds. *Molecules*, 2023, 28 (2), 633. <https://doi.org/10.3390/molecules28020633>
3. Golubeva E.A., Lavrov M.I., Veremeeva P.N., Vyunova T.V., Shevchenko K.V., Topchiy M.A., Asachenko A.F., Palyulin V.A. New allosteric modulators of AMPA receptors: Synthesis and study of their functional activity by radioligand-receptor binding analysis. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, 24 (12), 10293. <https://doi.org/10.3390/ijms241210293>
4. Vasilenko D.A., Temnyakova N.S., Dronov S.E., Radchenko E.V., Grishin Y.K., Gabrel'yan A.V., Zamoyski V.L., Grigoriev V.V., Averina E.B., Palyulin V.A. 5-Nitroisoxazoles in SNAr reactions: A novel chemo- and regioselective approach to isoxazole-based bivalent ligands of AMPA receptors. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, 24 (22), 16135. <https://doi.org/10.3390/ijms242216135>
5. Sedenkova K.N., Zverev D.V., Nazarova A.A., Lavrov M.I., Radchenko E.V., Grishin Y.K., Gabrel'yan A.V., Zamoyski V.L., Grigoriev V.V., Averina E.B., Palyulin V.A. Novel nanomolar allosteric modulators of AMPA receptor of bis(pyrimidine) series: Synthesis, biotesting and SAR analysis. *Molecules*, 2022, 27 (23), 8252. <https://doi.org/10.3390/molecules27238252>
6. Shulga D.A., Ivanov N.N., Palyulin V.A. In silico structure-based approach for group efficiency estimation in fragment-based drug design using evaluation of fragment contributions. *Molecules*, 2022, 27 (6), 1985. <https://doi.org/10.3390/molecules27061985>
7. Vasilenko D.A., Sadovnikov K.S., Sedenkova K.N., Karlov D.S., Radchenko E.V., Grishin Y.K., Rybakov V.B., Kuznetsova T.S., Zamoyski V.L., Grigoriev V.V., Palyulin V.A., Averina E.B. A facile approach to bis(isoxazoles), promising ligands of the AMPA receptor. *Molecules*, 2021, 26 (21), 6411. <https://doi.org/10.3390/molecules26216411>
8. Lavrov M.I., Karlov D.S., Voronina T.A., Grigoriev V.V., Ustyugov A.A., Bachurin S.O., Palyulin V.A. Novel positive allosteric modulators of AMPA receptors based on 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane scaffold. *Molecular Neurobiology*, 2020, 57 (1), 191–199. <https://doi.org/10.1007/s12035-019-01768-6> IF
9. Radchenko E.V., Dyabina A.S., Palyulin V.A. Towards deep neural network models for the prediction of the blood–brain barrier permeability for diverse organic compounds. *Molecules*, 2020, 25 (24), 5901. <https://doi.org/10.3390/molecules25245901>
10. Dueva E.V., Tuchynskaya K.K., Kozlovskaya L.I., Osolodkin D.I., Sedenkova K.N., Averina E.B., Palyulin V.A., Karganova G.G. Spectrum of antiviral activity of 4-aminopyrimidine N-oxides against a broad panel of tick-borne encephalitis virus strains. *Antiviral Chemistry and Chemotherapy*, 2020, 28, 2040206620943462. <https://doi.org/10.1177/2040206620943462>
11. Berishvili V.P., Kuimov A.N., Voronkov A.E., Radchenko E.V., Kumar P., Choonara Y.E., Pillay V., Kamal A., Palyulin V.A. Discovery of novel tankyrase inhibitors through molecular docking-based virtual screening and molecular dynamics simulation studies. *Molecules*, 2020, 25 (14), 3171. <https://doi.org/10.3390/molecules25143171>
12. Nazarova A.A., Sedenkova K.N., Karlov D.S., Lavrov M.I., Grishin Y.K., Kuznetsova T.S., Zamoyski V.L., Grigoriev V.V., Averina E.B., Palyulin V.A. Bivalent AMPA receptor positive allosteric modulators of the bis(pyrimidine) series. *MedChemComm*, 2019, 10, 1615–1619. <https://doi.org/10.1039/c9md00262f>
13. Nikitina A.A., Orlov A.A., Kozlovskaya L.I., Palyulin V.A., Osolodkin D.I. Enhanced taxonomy annotation of antiviral activity data from ChEMBL. *Database: the journal of biological databases and curation*, 2019, bay139, <https://doi.org/10.1093/database/bay139>

14. Berishvili V.P., Perkin V.O., Voronkov A.E., Radchenko E.V., Syed R., Venkata Ramana R.C., Pillay V., Kumar P., Choonara Y.E., Kamal A., Palyulin V.A. Time-domain analysis of molecular dynamics trajectories using deep neural networks: Application to activity ranking of tankyrase inhibitors. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2019, 59 (8), 3519-3532. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00135>

Даём согласие на размещение персональных данных на официальном сайте ФГБУН НИОХ СО РАН и в единой информационной системе, включение персональных данных в аттестационное дело и их дальнейшую обработку.

Зав. кафедрой медицинской химии и тонкого органического синтеза
химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова,
д.х.н., проф.

Е.Р. Милаева

Зам. декана химического факультета МГУ
имени М.В.Ломоносова по научной работе, д.х.н.

М.Э. Зверева

Проректор Федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Московский государственный
университет имени М.В.Ломоносова», д.ф.-м.н.

А.А. Федянин

