

**Сведения о научных руководителях  
диссертации Гущиной Ирины Владимировны  
«Разработка сульфозамещенных ингибиторов транскетолазы и  
тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 с использованием методов биоинформатики и  
молекулярного моделирования»**

**Научный руководитель:** Нилов Дмитрий Константинович

**Ученая степень:** кандидат химических наук

**Ученое звание:** -

**Должность:** старший научный сотрудник НИИ физико-химической биологии имени А.Н.Белозерского

**Место работы:** Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

**Адрес места работы:** 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 40

**Тел.:** +7 (903) 787-7627

**E-mail:** nilov@belozersky.msu.ru

**Список основных научных публикаций по специальности 03.01.08 – Биоинженерия за последние 5 лет:**

1. Manasaryan G., Suplatov D., Pushkarev S., Drobot V., Kuimov A., Švedas V., Nilov D. Bioinformatic analysis of the nicotinamide binding site in poly(ADP-ribose) polymerase family proteins. (2021) *Cancers (Basel)*, 13, 1201.
2. Zamaraev A.V., Volik P.I., Nilov D.K., Turkina M.V., Egorshina A.Y., Gorbunova A.S., Iarovenko S.I., Zhivotovsky B., Kopeina G.S. Requirement for serine-384 in caspase-2 processing and activity. (2020) *Cell Death Dis.*, 11, 825.
3. Gushchina I.V., Polenova A.M., Suplatov D.A., Švedas V.K., Nilov D.K. vsFilt: A tool to improve virtual screening by structural filtration of docking poses. (2020) *J. Chem. Inf. Model.*, 60, 3692-3696.
4. Nilov D., Maluchenko N., Kurgina T., Pushkarev S., Lys A., Kutuzov M., Gerasimova N., Feofanov A., Švedas V., Lavrik O., Studitsky V.M. Molecular mechanisms of PARP-1 inhibitor 7-methylguanine. (2020) *Int. J. Mol. Sci.*, 21, 2159.
5. Нилов Д.К., Пушкарев С.В., Гущина И.В., Манасарян Г.А., Кирсанов К.И., Швядас В.К. Моделирование фермент-субстратных комплексов поли(ADP-рибозо)полимеразы 1 человека. (2020) *Биохимия*, 85, 116-125.
6. Dyrkheeva N., Luzina O., Filimonov A., Zakharova O., Ilina E., Zakharenko A., Kuprushkin M., Nilov D., Gushchina I., Švedas V., Salakhutdinov N., Lavrik O. Inhibitory effect of new semisynthetic usnic acid derivatives on human tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1. (2019) *Planta Med.*, 85, 103-111.
7. Нилов Д.К., Яшина К.И., Гущина И.В., Захаренко А.Л., Суханова М.В., Лаврик О.И., Швядас В.К. 2,5-Дикетопиперазины: новый класс ингибиторов поли(ADP-рибозо)полимеразы (2018) *Биохимия*, 83, 251-258.
8. Гущина И.В., Нилов Д.К., Захаренко А.Л., Лаврик О.И., Швядас В.К. Моделирование структуры и скрининг ингибиторов тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 человека. (2017) *Acta Naturae*, 9, 62-69.

**Научный руководитель:** Швядас Витаутас-Юозапас Каятоно  
**Ученая степень:** доктор химических наук  
**Ученое звание:** профессор  
**Должность:** профессор факультета биоинженерии и биоинформатики  
**Место работы:** Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
**Адрес места работы:** 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 73  
**Тел.:** +7 (495) 939-2355  
**E-mail:** vytautas@belozersky.msu.ru

**Список основных научных публикаций по специальности 03.01.08 – Биоинженерия за последние 5 лет:**

1. Timonina D., Sharapova Y., Švedas V., & Suplatov D. Bioinformatic analysis of subfamily-specific regions in 3D-structures of homologs to study functional diversity and conformational plasticity in protein superfamilies. (2021) *Computat. Struct. Biotechnol. J.*, 19, 1302-1311.
2. Manasaryan G., Suplatov D., Pushkarev S., Drobot V., Kuimov A., Švedas V., Nilov D. Bioinformatic analysis of the nicotinamide binding site in poly(ADP-ribose) polymerase family proteins. (2021) *Cancers (Basel)*, 13, 1201.
3. Sharapova Y., Švedas V., & Suplatov D. Catalytic and lectin domains in neuraminidase A from *Streptococcus pneumoniae* are capable of an intermolecular assembly: Implications for biofilm formation. (2020) *FEBS J.*
4. Nilov D., Maluchenko N., Kurgina T., Pushkarev S., Lys A., Kutuzov M., Gerasimova N., Feofanov A., Švedas V., Lavrik O., Studitsky V.M. Molecular mechanisms of PARP-1 inhibitor 7-methylguanine. (2020) *Int. J. Mol. Sci.*, 21, 2159.
5. Suplatov D., Sharapova Y., Geraseva E., & Švedas V. Zebra2: advanced and easy-to-use web-server for bioinformatic analysis of subfamily-specific and conserved positions in diverse protein superfamilies. (2020) *Nucleic Acids Res.*, 48, W65-W71.
6. Gushchina I.V., Polenova A.M., Suplatov D.A., Švedas V.K., Nilov D.K. vsFilt: A tool to improve virtual screening by structural filtration of docking poses. (2020) *J. Chem. Inf. Model.*, 60, 3692-3696.
7. Dyrkheeva N., Luzina O., Filimonov A., Zakharova O., Ilina E., Zakharenko A., Kuprushkin M., Nilov D., Gushchina I., Švedas V., Salakhutdinov N., Lavrik O. Inhibitory effect of new semisynthetic usnic acid derivatives on human tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1. (2019) *Planta Med.*, 85, 103-111.
8. Akparov V. K., Timofeev V. I., Konstantinova G. E., Khaliullin I. G., Kuranova I. P., Rakitina T. V., & Švedas V. The nature of the ligand's side chain interacting with the S1'-subsite of metallo-carboxypeptidase T (from *Thermoactinomyces vulgaris*) determines the geometry of the tetrahedral transition complex. (2019) *PLoS One*, 14, e0226636.
9. Suplatov D., Timonina D., Sharapova Y., & Švedas V. Yosshi: a web-server for disulfide engineering by bioinformatic analysis of diverse protein families. (2019) *Nucleic Acids Res.*, 47, W308-W314.
10. Shegay M. V., Suplatov D. A., Popova N. N., Švedas V. K., & Voevodin V. V. parMATT: parallel multiple alignment of protein 3D-structures with translations and twists for distributed-memory systems. (2019) *Bioinformatics*, 35, 4456-4458.

11. Suplatov D. A., Kopylov K. E., Popova N. N., Voevodin V. V., & Švedas V. K. Mustguseal: a server for multiple structure-guided sequence alignment of protein families. (2018) Bioinformatics, 34, 1583-1585.

12. Sharapova Y., Suplatov D., & Švedas V. Neuraminidase A from streptococcus pneumoniae has a modular organization of catalytic and lectin domains separated by a flexible linker. (2018) FEBS J., 285, 2428-2445.

Ученый секретарь  
диссертационного совета МГУ.03.04,  
И.В. Шаповалова



*И. Шаповалова*  
Подпись, печать