

	Шитяков Сергей Васильевич MD, PhD, DSc (Dr. med. habil.) Full Professor (Ordinarius)
Научные интересы	Нейробиология, прецизионная медицина, биоинформатика, биомедицинская инженерия и разработка рациональных препаратов для воздействия на гематоэнцефалический барьер с применением современных методов компьютерного моделирования химических взаимодействий
Отличительные особенности программы	Возможность публикации результатов исследования в рецензируемых журналах с высоким импакт-фактором, включая журналы Nature, Cerebral Cortex, Blood, ACS и RSC
Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство)	Грант Газпромнефть–Смазочные материалы, № A220003100, QSAR моделирование для прогнозирования характеристик масел, 06/2023–08/2023 (исполнитель)
Перечень возможных тем для исследования	✓ Разработка методов виртуального скрининга ✓ Создание виртуальных библиотек ✓ Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR) химических соединений ✓ Экспериментальная проверка моделей QSAR
Количество публикаций в журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, за последние 5 лет	46
Основные публикации	1. Shityakov S., Skorb E., Nosonovsky M. Folding–unfolding asymmetry and a RetroFold computational algorithm//Royal Society Open Science, 2023, Vol. 10, No. 5, pp. 221594 2. Kovalenko A.A., Porozov Y.B., Skorb E.V., Shityakov S. Using novel click chemistry algorithm to design D3R inhibitors as blood-brain barrier permeants//Future Medicinal Chemistry, 2023, Vol. 15, No. 11, pp. 923-935 3. Muravev A.A., Voloshina A.D., Sapunova A.S., Gabdrakhmanova F.B., Lenina O.A., Petrov K.A., Shityakov S., Skorb E.V., Solovieva S.E., Antipin I.S. Calix[4]arene–pyrazole conjugates as potential cancer therapeutics//Bioorganic Chemistry, 2023, Vol. 139, pp. 106742

	4. Dutta K., Shityakov S., Maruyama F. DSF inactivator RpfB homologous FadD upregulated in Bradyrhizobium japonicum under iron limiting conditions//Scientific Reports, 2023, Vol. 13, No. 1, pp. 8701 5. Iwaloye O., Ottu P.O., Olawale F., Babalola O.O., Elekofehinti O.O., Kikiowo B., Adegboyega A.E., Ogbonna H.N., Adeboboye C.F., Folorunso I., Fakayode A.E., Akinjiyan M.O., Onikanni S.A., Shityakov S. Computer-aided drug design in anti-cancer drug discovery: What have we learnt and what is the way forward?//Informatics in Medicine Unlocked, 2023, Vol. 41, pp. 101332
Требования, предъявляемые к аспиранту	✓ Уверенное владение языками программирования ✓ Опыт работы с программным обеспечением визуализации сложных (био)молекул
Наименование научных специальностей для зачисления аспиранта	1.4.5 Хемоинформатика 1.4.4 Физическая химия