

	<p>Шитяков Сергей Васильевич PhD</p>
<p>Научные интересы</p>	<p>Нейробиология, прецизионная медицина, биоинформатика, биомедицинская инженерия и разработка рациональных препаратов для воздействия на гематоэнцефалический барьер с применением современных методов компьютерного моделирования химических взаимодействий</p>
<p>Отличительные особенности программы</p>	<p>Возможность публикации результатов исследования в рецензируемых журналах с высоким импакт-фактором, включая журналы Nature, Cerebral Cortex, Blood, ACS и RSC</p>
<p>Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство)</p>	<p>Грант Газпромнефть–Смазочные материалы, № A220003100, QSAR моделирование для прогнозирования характеристик масел, 06/2023–08/2023 (исполнитель)</p>
<p>Перечень возможных тем для исследования</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Разработка методов виртуального скрининга</li> <li>✓ Создание виртуальных библиотек</li> <li>✓ Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR) химических соединений</li> <li>✓ Экспериментальная проверка моделей QSAR</li> </ul>
<p>Количество публикаций в журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, за последние 5 лет</p>	<p>46</p>
<p>Основные публикации</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>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</li> <li>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</li> <li>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</li> </ol>

	<p>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</p> <p>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</p>
Требования, предъявляемые к аспиранту	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ Уверенное владение языками программирования</li> <li>✓ Опыт работы с программным обеспечением визуализации сложных (био)молекул</li> </ul>
Наименование научных специальностей для зачисления аспиранта	<p>1.4.5 Хемоинформатика</p> <p>1.4.4 Физическая химия</p>