

## Сведения о ведущей организации при защите диссертации

### Тинькова Олега Викторовича

Полное наименование организации в соответствии с Уставом	Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Сокращенное наименование организации в соответствии с Уставом	ФГАОУ ВО КФУ, ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казанский университет, Казанский федеральный университет, КФУ
Почтовый индекс, адрес организации	420008, Россия, РТ, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18
Телефон	Тел. (843) 233-71-09
Адрес электронной почты	public.mail@kpfu.ru
Веб-сайт	http://kpfu.ru

Список основных публикаций по теме диссертации соискателя в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Madzhidov T.I. Estimation of the size of drug-like chemical space based on GDB-17 data // J. Comput. Aided. Mol. Des. Springer Netherlands, 2013. - № 8. - P. 675–679.
2. Madzhidov T.I. Predictive Models for Halogen-bond Basicity of Binding Sites of Polyfunctional Molecules // Mol. Inform., 2016. – V. 35, Is. 2. – P. 70–80
3. Madzhidov T.I. Predictive Models for the Free Energy of Hydrogen Bonded Complexes with Single and Cooperative Hydrogen Bonds. // Mol. Inform., 2016. – V. 35 – P. 629–638.
4. Madzhidov T.I. Generative Topographic Mapping Approach to Modeling and Chemical Space Visualization of Human Intestinal Transporters // BioNanoSci, 2016. – № 6. – P. 464.
5. Varnek A. Structural and Physico-Chemical Interpretation (SPCI) of QSAR Models and Its Comparison with Matched Molecular Pair Analysis // J. Chem. Inf. Model., 2016. - №8. - P. 1455–1469.
6. Varnek A. Redox Polypharmacology as an Emerging Strategy to Combat Malarial Parasites // ChemMedChem, 2016. – №12. – P.1339–1351.
7. Varnek A. Generative Topographic Mapping Approach to Chemical Space Analysis // Frontiers in Molecular Design and Chemical Information Science - Herman Skolnik Award Symposium 2015: Jürgen Bajorath, 2016. - Chapter 11. – P. 211–241.

8. Varnek A. Mappability of drug-like space: towards a polypharmacologically competent map of drug-relevant compounds // *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 2015. - №12. – P. 1087-1108.
9. Baskin I.I . Chemical data visualization and analysis with incremental generative topographic mapping: big data challenge // *J. Chem. Inf. Model.*, 2015. - №1. – P. 84–94.
10. Varnek A. Electrochemical properties of substituted 2-methyl-1,4-naphthoquinones: Redox behavior predictions // *Chemistry: a European journal*, 2015. - №8. – P. 3415-3424.
11. Baskin I.I . Stargate GTM: Bridging Descriptor and Activity Spaces // *J. Chem. Inf. Model.*, 2015. - №11. – P. 2403–2410.
12. Baskin I.I . Continuous indicator fields: a novel universal type of molecular fields // *J. Comput. Aided Mol. Des.*, 2015. - №3. - P. 233–247.
13. Madzhidov T.I. Structure-reactivity relationships in terms of the condensed graphs of reactions // *Russian Journal of Organic Chemistry*, 2014. - №4. – P. 459–463.
14. Tropsha A. Public (Q) SAR Services, Integrated Modeling Environments, and Model Repositories on the Web: State of the Art and Perspectives for Future Development // *Molecular Informatics*, 2016. DOI: 10.1002/minf.201600082
15. Tropsha A. QSAR models of human data can enrich or replace LLNA testing for human skin sensitization // *Green Chem.*, 2016. - №24. – P. 6501-6515