

## РЕФЕРАТ

### Аналіз небезпечної дії хімічних забруднювачів, зокрема військового призначення, методами теоретичної хімії та хемоінформатики (02 – Хімічні науки)

Екологічна ситуація, яка склалася у світі, спонукала все цивілізоване людство усвідомити, що подальше безвідповідальне ставлення до природи може завершитися глобальною катастрофою. Одна з найважливіших екологічних проблем – хімічне забруднення довкілля. Воно є найбільш небезпечним, тому що його негативний вплив закріплюється на генетичному рівні, а забруднюючі речовини спричиняють глобальний ефект.

Хімічні речовини в нашому довкіллі можна поділити на дві групи - речовини притаманні природі та чужі до неї (ксенобіотики). Останні є найбільш небезпечними чужорідними для біосфери хімічними речовинами, що природно не синтезуються, не можуть асимілюватись організмами внаслідок чого не беруть участі у кругообігу речовин у природі, а тому накопичуються у зовнішньому середовищі. Ці речовини зазвичай присутні у природі у набагато менших кількостях (або не присутні зовсім), і, як правило, прямо або побічно породжені господарською діяльністю людини.

Війна в Україні впливає не лише на продовольчу безпеку та має економічні наслідки для всіх країн. Сьогодні це ще й питання екологічної безпеки та спільного майбутнього. Забруднення від обстрілів, це залишки високоенергетичних речовин (вибухівки) та продуктів їх окиснення та взаємодії з іншими речовинами довкілля. У реальних умовах продукти вибуху ракети та її палива можуть взаємодіяти між собою, з ґрунтовими водами, з вологою повітря та киснем. Крім того, суттєве забруднення може виникати в результаті артилерійських та авіаударів по підприємствах, які використовують або продукують небезпечні хімічні речовини у виробництві, зокрема пестициди, гербіциди, діоксини, тощо.

Для своєчасного реагування на екологічну небезпеку від хімічного забруднення здійснюється регулярний моніторинг довкілля та експертиза потенційних полютантів. Для останнього завдання вельми перспективним є комп'ютерне моделювання зв'язку «структура - властивості» речовин – потенційних забруднювачів. Для цих речовин такі моделі можуть забезпечувати позаекспериментальний скринінг їхньої екологічної небезпеки. Проблема хімічного забруднення має не тільки суттєве соціальне значення, але й загальнонаукове.

Таким чином, на основі вищесказаного, мета представленої роботи - розробка наукових засад прогнозування тих хімічних, біологічних і фізичних властивостей хімічних сполук, які зрештою, обумовлюють їх небезпеку щодо

довкілля та здоров'я людини, з використанням хемо- та біоінформаційних технологій, сучасних методів теоретичної хімії – є актуальною та своєчасною. Задля досягнення цієї мети необхідно створення та реалізація системи різноманітних моделей для розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів довкілля.

На основі оригінального симплексного представлення молекулярної структури створено ієрархічну QSAR технологію (HIT QSAR - Hierarchical Information Technology of QSAR), унікальна і принципова особливість якої полягає в багатоплановості, що стосується: моделей опису молекулярної структури сполук, моделей опису атомів в молекулярних симплексах, структурних параметрів, шкал оцінки активності, математичних методів, що використовуються для встановлення зв'язку структура – активність. Різноманітність симплексних дескрипторів, що базуються на зрозумілих фізико-хімічних принципах, дозволяє не лише створювати адекватні прогнозуючі моделі з високими статистичними характеристиками, але також проводити детальну структурну та фізико-хімічну інтерпретації цих моделей. Список об'єктів, до яких можна застосувати симплексний підхід дуже широкий – від простих неорганічних сполук до складних органічних молекулярних та супрамолекулярних систем, включаючи наночастинки. Унікальною особливістю симплексного підходу також є можливість адекватного опису суміші сполук з урахуванням взаємодії їх компонентів.

Розроблено новий теоретичний підхід до вивчення механізмів і кінетики реакцій розпаду хімічних забруднювачів, що дозволяє прогнозувати методи ефективного вилучення їх з навколишнього середовища. З використанням цього підходу здійснено розробку і апробацію методу моделювання кінетики багатостадійної реакції з метою прогнозування швидкості розпаду різноманітних забруднювачів навколишнього середовища до стійких низькомолекулярних сполук (таких, як карбон (IV) оксид, вода, азот, аміак). Розроблений метод складається з кількох етапів. Перший – це генерування багатостадійного енергетичного профілю трансформації реагентів у продукти, що базується на квантово-хімічних розрахунках. Необхідно відмітити, що змодельований механізм підтверджується експериментально визначеними структурами продуктів і співпадінням експериментальних і теоретично розрахованих, УФ та ЯМР спектрів продуктів (у разі їх наявності). Другий етап – розрахунок констант швидкості для усіх стадій реакції, розв'язання диференціальних кінетичних рівнянь для усіх учасників реакційного процесу (реагентів, інтермедіатів та продуктів), графічне представлення кінетичних кривих. Застосування масштабуючого множника до величин вільної енергії Гіббса для узгодження розбіжностей теорії і практики, які можуть виникати у

зв'язку з недостатнім врахуванням сольватаційних ефектів, головним чином, специфічної сольватації, при квантово-хімічному моделюванні механізму реакції, приводить до одержання кінетичних кривих, які відтворюють експериментальні дані з достатньою точністю. Розроблена процедура дозволяє значно розширити кількість експериментально визначених стадій реакції теоретично прогнозованими, передбачити концентрацію будь-якого реагенту, інтермедіату чи продукту у будь-який момент часу, змоделювати кінетичну поведінку учасників реакційного процесу за різної температури і початкової концентрації реагентів.

Методами хемоінформатики та квантової хімії досліджено велику кількість (більш 10000) сполук (зокрема військового призначення), більшість з яких є потенційно небезпечними для людини та навколишнього середовища. Для усіх сполук аналізували різноманітні види токсичності (гостра токсичність, водна токсичність на *Tetrahymena pyriformis* та *Vibrio fischeri*, гепатотоксичність, кардіотоксичність, нейротоксичність, цитотоксичність, сенсibiliзація шкіри, інсектицидна активність, токсичність відносно естрогенових та андрогенових рецепторів), які безпосередньо визначають небезпеку, та деякі властивості, що створюють умови для розповсюдження забруднювачів в довкіллі та їх проникнення у біологічні об'єкти, зокрема, такі як біо- та нейродоступність, реакційна здатність взаємодії зі середовищем та біологічними мішенями, водна розчинність, ліпофільність, здатність до адсорбції тощо, а також структурні механізми, що сприяють знешкодженню небезпечних сполук в живих організмах.

Проаналізовано екологічно важливі фізико-хімічні властивості хімічних забруднювачів. На основі моделювання процесів розчинення у воді та адсорбції на компонентах ґрунту, а також залежності величин розчинності та енергій адсорбції від температури спрогнозовано розподіл речовин-забруднювачів у навколишньому середовищі. Показано вплив окисно-відновних перетворень речовин на їх здатність до адсорбції.

На підставі детального аналізу різних теоретичних наближень і сольватаційних моделей на предмет точності розрахунку потенціалів відновлення і окиснення здійснено систематичний пошук теоретичних наближень для розрахунку окисно-відновних властивостей органічних сполук. Виявлено відносно нетрудомісткі квантово-хімічні наближення розрахунку потенціалів відновлення і окиснення з точністю 0,1-0,2 eV, які можуть бути використані для передбачення окисно-відновних властивостей для тих сполук, для яких дуже важко або неможливо здійснити експериментальне визначення. На основі порівняльного аналізу розрахованих величин потенціалів відновлення і окиснення охарактеризовано здатність різних речовин забруднювачів до окисно-відновних перетворень. Розраховані потенціали відновлення і окиснення

можуть бути використані для пошуку сполук, які можуть легко вступати у окисно-відновні реакції з хімічними забруднювачами з метою їх хімічного перетворення, і, відповідно, усунення їх негативного впливу на навколишнє середовище. Із застосуванням діаграми Пурбе, наприклад, можна виявити типи сполук феруму, які здатні відновити конкретні органічні сполуки на основі відомостей про величини їх потенціалів відновлення.

На основі моделювання механізму і кінетики реакцій розпаду хімічних забруднювачів спрогнозовано їх поведінку у навколишньому середовищі. Встановлено механізм відновлення нітрогрупи за допомогою флавінмононуклеотид-залежної нітроредуктази, яка присутня у ряді мікроорганізмів. Молекулярно-динамічний аналіз активного центру нітроредуктази дозволив охарактеризувати зміну просторової структури ферменту в процесі відновлення нітросполук. Більш глибоке розуміння закономірностей роботи нітроредуктази сприятиме розробці нових і кращих мутантів даного ферменту і, таким чином, підвищить його ефективність для біологічного розкладу нітросполук.

Розроблені механізми процесу деградації нітросполук під дією луку, синглетного кисню та гідроксид-радикалу роблять внесок у вдосконалення технологій видалення нітросполук із навколишнього середовища. Показано зв'язок структури, а також різних факторів навколишнього середовища (температура, рН, випромінювання), з ефективністю біологічного і абіотичного розкладу хімічних забруднювачів.

Здійснено реконструкцію просторової структури ряду ензимів – мішеней для специфічного зв'язування хімічних чинників і розроблено моделі взаємодії таких ензимів з інгібіторами та мутагенами, зокрема, вивчено взаємодію гербіцидів з рослинними тубулінами, 5-енолпірувілшикімат-3-фосфатсинтазою, альдокеторедуктазами EcAKR4-1, LrAKR4C10, LrAKR, касетним транспортером ABC8, глутамінсинтетазою та ін. Досліджено метаболізм пестицидів і виявлено нові молекулярні і структурні механізми, що забезпечують стійкість рослинних клітин до небезпечних хімічних чинників, серед яких збільшення спорідненості до природних субстратів та спряжене мультисубстратне окислення відновлення без обміну кофактора в активному центрі фермента.

Визначено групи механізмів, що забезпечують відповідну стійкість до хімічних сполук (гербіцидів):

- а) Зміни в просторовій структурі біологічної макромолекули, яка є (основною) клітинною мішенню для молекули гербіцида. В наслідок таких змін спостерігається часткова або повна втрата афінності біомакромолекули до відповідної молекули гербіциду. Зазвичай ці зміни є наслідком точкових

мутацій/амінокислотних замін. Цей механізм є найбільш «канонічним» і найбільш добре дослідженим. Прикладами стійкості, яка виникає за цим механізмом, є, зокрема, стійкість рослин до динітроанілінових сполук. Встановлено, що ці гербіциди здатні зв'язуватись з альфа- та бета-субодинами білка тубуліну, перешкоджати їх подальшій асоціації в мікротрубочки, що, в свою чергу, приводить до неможливості формування такої структури, як веретено поділу, і зупинці процесів поділу рослинних клітин. Амінокислоти, мутації по яких зменшують афінність до цих речовин, розташовуються або безпосередньо в сайті зв'язування динітроанілінів (так само як фосфоротіоамідів та цианоакрилатів) на поверхні молекул тубуліну – білка, що є їх безпосередньою клітинною мішенню (Arg-243 альфа-субодина тубуліну), або недалеко від сайту зв'язування (Thr-239, Met-268 тієї ж альфа-субодина). Стійкість до зазначених класів гербіцидів є перехресною, що цілком зрозуміло з огляду на наявність спільного сайту зв'язування цих речовин на поверхні молекул тубуліну.

- б) Зміни в просторовій структурі бімолекулярної мішені, які приводять до суттєвого збільшення її афінності до відповідного природного біомолекулярного партнера (зокрема, сюди відноситься збільшення спорідненості ферменту до природного субстрату). Афінність до гербіциду при цьому не змінюється (а в деяких випадках може навіть трішки зростати), проте це ефективно компенсується багатократним підвищенням ефективності взаємодії з нативним партнером. Цей механізм спостерігається у випадках підвищення стійкості до гліфосату у *Tridax procumbens* внаслідок заміни Thr-102-Ser в молекулі 5-енолпірувілшкімат-3-фосфатсинтази – основної клітинної мішені цього гербіцида та підвищення стійкості до глюфосінату внаслідок заміни Ser-59-Gly в молекулі глутамінсинтетази.
- в) Ферментативна метаболізація молекули гербіциду до біобезпечних сполук, нездатних наносити шкоду рослинній клітині. Цей механізм пов'язаний з гіперекспресією генів відповідних ензимів і є характерним, зокрема, для стійкості до гліфосату, яка спостерігається у *Echinochloa colona*, і опосередкована активністю альдокеторедуктази EcAKR4-1, яка здатна здійснювати окислення гліфосату з наступним утворенням амінометилфосфонові кислоти та гліоксалату, нетоксичних для рослинної клітини, та аналогічної стійкості у *Lolium rigidum*, яка опосередкована активністю альдокеторедуктаз LrAKR4C10 та LrAKR1.
- г) Пряме виведення молекул гербіцидів з клітини за допомогою мембранних транспортерів. Такий механізм охарактеризовано нами у випадку стійкості до гліфосату у іншій лінії *Echinochloa colona*, яка у цьому випадку обумовлена гіперекспресією транспортера ABCC8, що є гомологом транспортера MDR1

(Multi Drug Resistance 1) людини і здатний забезпечувати екскрецію різноманітних шкідливих речовин за межі рослинної клітини, подібно до його людського «родича».

В результаті аналізу побудованих адекватних QSAR моделей при дослідженні гострої токсичності нітроароматичних сполук виявлено, що токсичність залежить як від положення замісника, так і від його природи. Показано, що взаємний вплив замісників у бензольному кільці грає рішучу роль в токсичності, при цьому вплив кожного замісника не є адитивним. Вплив різних замісників на токсичність може бути опосередкований через різні C–H-фрагменти ароматичного кільця. Вплив нітрогрупи на токсичність сильно залежить від присутності/ відсутності інших замісників і варіюється від сильно позитивного до слабо негативного. Гідроксильні і флуоровмісні замісники збільшують токсичність, а присутність метильної групи, навпаки, знижує її, в той час як хлор має нейтральний вплив.

При аналізі водної токсичності хімічних сполук, досліджених на інфузоріях *Tetrahymena pyriformis*, показано, що найбільш важливими при взаємодії токсикантів з їх біологічною мішенню є гідрофобні і електростатичні чинники. Встановлено також високий вплив ліпофільності та поляризованості досліджуваних сполук на токсичність. В результаті дослідження властивостей методу випадкового лісу (RF - Random Forest) було показано, що його моделі є толерантними до вставки нерелевантних дескрипторів, а також до рандомізації деякої частини значень токсичності, які представляють «шум».

Для вивчення гепатотоксичності розроблено гібридні моделі, які включають хімічні дескриптори (зокрема симплексні дескриптори) і токсикогеномні профілі (транскрипти). Такі моделі сприяють кращому розумінню механізму субхронічного пошкодження печінки і дозволяють з великою точністю прогнозувати гепатотоксичність.

Розроблено комплекс моделей структура-активність з адекватною прогнозуючою здатністю, що відрізняють сенсibilізатори від несенсibilізаторів шкіри (своєрідна токсичність). Розширений аналіз з використанням як експериментально виміряних даних, так і даних моделювання підтвердив відсутність будь-якої загальної узгодженості між проникністю шкіри та шкірною сенсibilізацією.

Комбінаторні 1D дескриптори разом з дескрипторами, що залежать від розміру, дозволили створити адекватні моделі nano-QSAR для цитотоксичності оксидів металів по відношенню до *HaCaT* та *E. Coli*. Зважені перехресні добутки пар дескрипторів використовувалися для відображення ефектів взаємодії різних структурних та фізико-хімічних факторів. Визначено, що основну роль у прояві цитотоксичності нанорозмірних оксидів металів грають характеристики самих

наночастинок і хімічна природа іонів металів. Головним чинником, що визначає цитотоксичність розглянутих нанооксидів, є величина заряду металу іона.

Розроблені незв'язні симплексні дескриптори для пар молекул дозволили дослідити вплив структур компонентів і складів сумішей сполук на їх різні властивості - інгібування ацетилхолінестерази, токсичності по відношенню до *Daphnia Magna*, температур кипіння та конденсації. Виявлено, що в різних задачах QSAR/QSPR відносний вклад дескрипторів суміші в загальний опис структури складає 20-60%. Порівняльний аналіз деяких хемоінформаційних підходів на прикладі фосфорорганічних інгібіторів ацетилхолінестерази показав, що симплексний підхід з використанням подвійних 2.5 D моделей дозволяє найбільш адекватно описати вибірку відповідних сполук, що містять рацемати та окремі енантіомери. Виявлено, що найбільшою мірою сприяють прояву токсичності електроноакцепторні замісники біля атома фосфору і ліпофільні групи (циклопентил і циклогексил) алкоксильного замісника.

В результаті QSAR аналізу токсичності бінарних сумішей натрієвих солей  $\alpha$ -алкоксикарбонілсульфокислот з фенолами і спиртами по відношенню до *Daphnia magna* виявлено, що збільшення довжини ланцюга алкільних замісників сприяє збільшенню токсичності, що, ймовірно, пов'язано із збільшенням ліпофільності сполук.

В результаті інтерпретації моделі дерев класифікації вдалося зробити оцінку вкладів деяких фрагментів молекул у зміну мутагенності сполук. Визначено, що поліциклічні ароматичні групи, нітрозаміни, алкілнітри і тріазен сильно збільшують мутагенність. Метаболіти поліциклічних ароматичних сполук можуть утворювати аддукти ДНК та виробляти токсичні ефекти. Групи нітрозамінів після ферментативного гідроксилювання сусіднього  $\alpha$ -вуглецю і до утворення та розщеплення зв'язку карбон-діазонію, перетворюються на електрофільний карбокатион, який також має токсичну дію. Однак, в результаті нашого аналізу такий відомий токсикофор як ароматична нітрогрупа має низький розрахунковий внесок у мутагенність. Це можна пояснити тим, що групи детоксикофорів, такі як карбонова кислота або складні ефіри арилсульфонової кислоти, трифторметиловий або арилсульфоніламідні фрагменти можуть нейтралізувати вплив токсичних фрагментів, зокрема  $\text{NO}_2$ . Як випливає з даної роботи, наявність цих детоксикантів у сполуках зменшує їхню токсичну дію.

Розроблено низку теоретичних моделей, які використано у міжнародному консенсусному дослідженні мутагенності (тест Еймса), в якому брали участь 13 лабораторій з України, Європи, США, Канади. Представлений підхід ідентифікує 30-60% сполук, які мають точність прогнозу, подібну до міжлабораторної точності тесту Еймса, яка оцінюється в 90%. Таким чином,

прогнозування *in silico* можна використовувати для зменшення вартості експериментальних вимірювань вдвічі, забезпечуючи аналогічну точність прогнозування.

Для оцінки біодоступності, періоду напіввиведення ( $\tau_{1/2}$ ), кліренсу та об'єму розподілу ( $V_d$ ) сполук в організмі людини побудовано адекватні QSAR моделі, на основі яких визначені фрагменти, що найбільш впливають на фармакокінетичні властивості. Виявлено, що наявність бензольних кілець збільшує біодоступність заміщених бенздіазепінів, збільшення кількості атомів Оксигену в молекулі приводить до зменшення біодоступності. Для загального кліренсу препарату спостерігалися тенденції, протилежні біодоступності. Так, наявність незаміщених бензольних кілець та  $\pi$ -донорних замісників ( $-F$ ,  $-Cl$ ,  $-Br$ ) в ароматичному кільці знижувала кліренс. Присутність  $\pi$ -акцепторів ( $-NO_2$ ) суттєво збільшувала його. Вплив структурних фрагментів на зміну  $\tau_{1/2}$  був дещо подібним до впливу на біодоступність. Вивчення впливу будови заміщених похідних бензодіазепіну на  $V_d$  виявило загальні тенденції впливу замісників, подібні для кліренсу. Виявлено, що електронна поляризованість молекулярних фрагментів сприяє збільшенню  $V_d$ , тоді як висока їх ароматичність та гідрофільність зменшують його.

Побудовано та проведено структурну інтерпретацію теоретичних моделей, що відображують вплив структури сполук на їх здатність проникати через гематоенцефалічний бар'єр (ГЕБ). Показано, що наявність високо полярних груп (карбоксильна, карбонільна, фенольна, гідроксильна) негативно впливає на здатність молекул проникати у мозок. Наявність атомів галогенів та ароматичних фрагментів позитивно впливає на ефективність перенесення сполук через ГЕБ. Показано, що для сполук з високою проникною здатністю через ГЕБ співвідношення між ліпофільністю та водною розчинністю повинні бути приблизно такими:  $3 \leq \text{Log}P \leq 6$ ;  $-5 \leq \text{Log}S_w \leq -1$ .

Розроблено адекватні 2D-QSPR моделі для прогнозу значення коефіцієнта розподілу в середовищі октанол-вода ( $\text{Log}K_{ow}$ ) для вибірки з 10973 органічних сполук. Слід зазначити неадитивний характер розроблених моделей: внесок ліпофільності, що розраховується за адитивною схемою, становив близько 30 % від суми важливостей дескрипторів.

Розроблено модель для прогнозування розчинності у воді при різних температурах. Порівняння показників  $S_w$ , отриманих за допомогою розробленої СПМС QSPR моделі та за допомогою квантово-хімічного та термодинамічного наближення COSMO-RS, показало кращу здатність прогнозування для першої моделі.

Низка наших робіт присвячена деяким проблемам водної розчинності. У цих роботах розглядаються нітроароматичні сполуки військового призначення,



розчинність у воді яких може становити серйозну небезпеку для довкілля. Зокрема, методологія СПМС використовувалася для розробки PLS моделей на основі навчальної вибірки з 135 сполук, а прогнозована точність була перевірена для 155 вибраних сполук. Використання 2D дескрипторів дало можливість отримати адекватну та надійну модель з високою прогнозою здатністю для зовнішньої тестової вибірки.

Цікавими об'єктами для дослідження водної розчинності виявилися комплексні солі – гексафторосилікати амонію. Особливу увагу в цій роботі було приділено впливу водневих зв'язків на процес розчинення. Добре відомо, що присутність гідрофільних груп відіграє ключову роль в Н-зв'язках і підвищує розчинність сполук у воді. Такі висновки цілком логічні, якщо йдеться про звичайні органічні сполуки. Однак, ситуація може бути іншою у випадку органічних солей або сполук амонію. Виявлено, що міцність іонної пари для гексафторосилікатів амонію визначається не лише взаємодією  $N^+H \cdots (SiF_6)^{2-}$ , але також іншими потенційними міжіонними Н-зв'язками, які, своєю чергою, негативно впливають на розчинність у воді.

На основі аналізу тенденції зміни експериментально отриманих і прогнозованих значень водної розчинності, ліпофільності, мутагенності по тесту Еймса, біодоступності, проникнення через гематоенцефалічний бар'єр, водної токсичності на *Tetrahyena pyriformis* і гострої оральної токсичності на щурах проведена комплексна розрахункова оцінка небезпеки нітроароматичних сполук для довкілля. Був зроблений висновок, що гідрофобні нітроароматичні сполуки, особливо з електроноакцепторними замісниками, галогенами або аміногрупами, є найбільш екологічно небезпечними.

У межах 1D-QSPR моделей виявлено можливість оцінки з прийнятною точністю коефіцієнтів в'язкості і теплопровідності різноманітних органічних речовин у газовій фазі. Такі моделі дозволяють проводити прогноз на основі тільки хімічного складу молекули. Показано, що ключовими параметрами для розрахунку зазначених властивостей є молекулярна маса, електронна поляризуємість, сума електронегативностей атомів. З аналізу цих моделей щодо теплопровідності випливає, що для багатоатомних молекул при перенесенні теплової енергії від однієї до іншої, частина цієї енергії витрачається на поляризацію другої молекули. Відносна частка цієї енергії варіюється в залежності від трьох, зазначених вище, молекулярних параметрів. Ця частка дорівнює 0% для інертних газів, для органічних молекул варіюється від 22% для малих полярних молекул (наприклад, діетилкарбонат) до 98% для багатоатомних молекул, що легко поляризуються (наприклад, метилгентриаконтіламін –  $C_{32}H_{67}N$ ), у середньому по вибірці – 87%. На основі розроблених моделей вдається також досить адекватно описати в'язкість та теплопровідність газових

бінарних сумішей, причому ключовими параметрами залишаються ті ж вищенаведені параметри.

Таким чином, фундаментальні результати роботи виявили важливі закономірності впливу структури молекул – полютантів на їхні властивості щодо екологічної небезпеки.

Прикладні досягнення роботи – низка комп'ютерних експертних систем для прогнозування основних властивостей речовин, що визначають екологічну небезпеку, зокрема: SToxTox, Pred-hERG, Pred-Skin, Chembench, Toxicity Value (CTV) Predictor – для різних видів токсичності, LipSol – для прогнозу розчинності, ліпофільності, AcrossBBB – для розрахунку показників проникнення через ГЕБ, TransProp Expert – для прогнозу в'язкості і теплопровідності. Усі експертні системи мають дружній інтерфейс та можуть використовуватися фахівцями самих різних спеціальностей задля позаекспериментального скринінгу потенційно небезпечних речовин. Більшість експертних систем доступні на відповідних сайтах Інтернету.

В цілому, розроблена комплексна система аналізу небезпеки хімічних забруднювачів не має аналогів в Україні та світі.

Кількість публікацій за роботою: 147, у т.ч. 13 колективних монографій у зарубіжних виданнях, 1 книга за редакцією, 3 навчальних посібника, 126 статей в журналах, включених до категорії "А" (у т.ч. 117 статей у зарубіжних виданнях) та 2 статті у журналах, включених до категорії "Б". Загальна кількість посилань на публікації авторів/h-індекс за роботою згідно з базами даних складає відповідно: Web of Science 6519/ 41, Scopus 7352/ 43, Google Scholar 9839/ 49. Отримано 2 свідоцтва про реєстрацію авторського права на комп'ютерну програму. За даною тематикою захищено 4 докторських та 10 кандидатських дисертацій.

КУЗЬМІН Віктор Євгенович

ГОРЬ Леонід Григорович

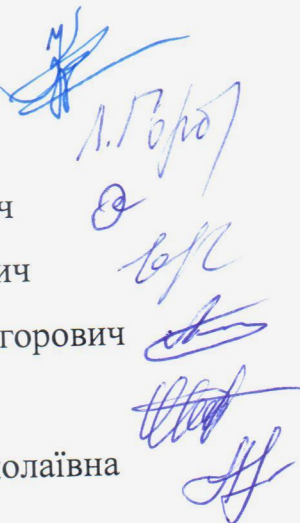
ОКОВИТИЙ Сергій Іванович

НИПОРКО Олексій Юрійович

АРТЕМЕНКО Анатолій Григорович

МУРАТОВ Євген Наїлевич

ОГНІЧЕНКО Людмила Миколаївна



**Перелік наукових публікацій, висунутих на присудження Національної премії**

<b>I. Колективні монографії</b>			
№ з/п	Назва публікації	Вихідні дані/ реквізити публікації	Авторський доробок (кількісний показник)
1	2	3	4
1.	Кузьмін В., Артеменко А., Огніченко Л., Муратов Е., Хромов А. Симплексное представление молекулярной структуры.	Под ред. Кузьмина В. Chisinau, Republic of Moldova: LAMBERT Academic Publishing, 2022. 91с.	Кузьмін В. 18, Артеменко А. 18, Огніченко Л. 18, Муратов Є. 18
2.	Dataset Modelability by QSAR: Continuous Response Variable. <i>Practical Aspects of Computational Chemistry V</i> / A. Golbraikh et.al.	Springer International Publishing, 2022. P. 233-253	Муратов Є. 3
3.	Косинская А., Огніченко Л., Кузьмін В. Структурные факторы молекул, определяющие их проникновение через ГЭБ	Chisinau, Republic of Moldova: LAMBERT Academic Publishing, 2022. 119 с.	Кузьмін В. 40, Огніченко Л. 40
4.	Application of Computational Approaches to Analysis of Multistep Chemical Reactions of Energetic Materials: Hydrolysis of Hexahydro-1, 3, 5-Trinitro-1, 3, 5-Triazine (RDX) and octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX). <i>Practical Aspects of Computational Chemistry</i> / L. K. Sviatenko et. al.	Ed. by J. Leszczynski, M. K. Shukla. Switzerland AG: Springer Nature, 2022. P. 215–232.	Горб Л. 3, Оковитий С. 3
5.	Combining Features of Metal Oxide Nanoparticles: Nano-QSAR for Cytotoxicity. <i>Research Anthology on Synthesis, Characterization, and Applications of Nanomaterials</i> / V.E. Kuz'min et. al.	Information Resources Management Association, 2021. P. 317-329. <a href="https://doi.org/10.4018/978-1-7998-8591-7">https://doi.org/10.4018/978-1-7998-8591-7</a> , ISBN10: 1799885917	Кузьмін В. 2, Огніченко Л. 2
6.	Structural, Physicochemical and Stereochemical Interpretation of QSAR Models Based on Simplex Representation of Molecular Structure. <i>Advances in QSAR modeling: Applications in Pharmaceutical, Chemical, Food, Agricultural and Environmental Sciences</i> / P. Polischuk et. al.	Ed. by K. Roy. Cham: Springer, 2017. P. 107–147.	Кузьмін В. 4, Артеменко А. 4, Огніченко Л. 4
7.	Application of Computational Techniques in Pharmacy and Medicine	Ed. by L. Gorb, V. Kuz'min, E. Muratov. Springer, Dordrecht, Hiedelberg, New York, London, 2014. 550 p.	Кузьмін В. 183, Муратов Є. 183, Горб Л. 183

1	2	3	4
8.	Quantitative Structure-Property Relationship Analysis of Drugs' Pharmacokinetics Within the Framework of Biopharmaceutics Classification System Using Simplex Representation of Molecular Structure. <i>Application of Computational Techniques in Pharmacy and Medicine</i> / N. Ya. Golovenko et. al.	Ed. by L. Gorb, V. Kuz'min, E. Muratov. Springer, Dordrecht, Hiedelberg, New York, London, 2014. P. 461–499.	Кузьмін В. 7, Муратов Є. 7
9.	New advances in QSPR/QSAR analysis of nitrocompounds: solubility, lipophilicity and toxicity. <i>Practical aspects of computational chemistry II</i> / L. N. Ognichenko et. al.	Ed. by J. Leszczynski, M. Shukla. Netherlands: Springer, 2012. P. 279–334	Кузьмін В. 6, Артеменко А. 6, Огніченко Л. 6, Муратов Є. 6, Горб Л. 6
10.	Progress in Prediction of Environmentally Important Physicochemical Properties of Energetic Materials: Applications of Quantum-Chemical Calculations. <i>Practical aspects of computational chemistry II</i> / L. Gorb et al.	Ed. by J. Leszczynski, M. Shukla. London: Springer, 2012. P. 335–359.	Кузьмін В. 4, Горб Л. 4, Муратов Є. 4
11.	Virtual screening and molecular design based on hierarchical QSAR technology. <i>Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Application</i> / V. E. Kuz'min et. al.	Dordrecht: Springer, 2010. P. 127–176.	Кузьмін В. 7, Артеменко А. 7, Огніченко Л. 7, Муратов Є. 7
12.	Nyporko A. Yu. , Blume Ya. B. Spatial distribution of tubulin mutations conferring resistance to antimicrotubular compounds. <i>The Plant Cytoskeleton: a Key Tool for Agro-Biotechnology</i>	Ed. by Ya. B. Blume, W. V. Baird, A. I. Yemets, D. Breviario. Dordrecht: Springer, 2008. P. 397–417. NATO Science for Peace and Security Series C- Environmental Security	Нипорко О. 10
13.	Michalkova A. , Gorb L. , Leszczynski J. Interactions of model organic species and explosives with clay minerals. <i>Energetic materials: Part I. Decomposition, crystal and molecular properties</i>	Ed. by P. A. Politzer and J. S. Murray. Elsevier Science, 2003. V. 12. P. 341–388.	Горб Л. 16
14.	Gorb L., Leszczynski J. Chemistry of the Liquid State: Current Trends in Quantum-Chemical Modeling. <i>Computational Chemistry: reviews of current trends</i>	World Scientific, 1999. V. 3. P. 179–213.	Горб Л. 17

1	2	3	4
<b>Навчальні посібники</b>			
1.	Нипорко О. Ю. Біоінформатика. Навчальний посібник. Частина 1. Аналіз біологічних послідовностей	Київ: Компринт, 2015. 105 с.	Нипорко О. 105
2.	Нипорко О. Ю. Лабораторний практикум курсу «Вибрані розділи загальної біології та цитології (для студентів небіологічних спеціальностей)»	Київ: Компринт, 2014. 45 с.	Нипорко О. 45
3.	Нипорко О. Ю. Програма спецпрактикуму «Структурне моделювання білків». Збірник програм нормативних та спеціальних курсів для студентів біологічного факультету	Київ: Фітосоціоцентр, 2004. С. 353-354	Нипорко О. 2

<b>П. Статті в журналах, включених до категорії "А"</b>			
№ з/п	Назва	Вихідні дані/ реквізити публікації	Співавтори
1	2	3	4
1.	NTO degradation by direct photolysis: DFT study.	<i>Structural Chemistry</i> . 2023. Vol. 34, No 1. P. 23–31.	Sviatenko L. K., Leszczynski J.
2.	Role of Molecular Singlet Oxygen in Photochemical Degradation of NTO: DFT Study.	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> . 2023. Vol. 127, No 12. P. 2688–2696.	Sviatenko L. K., Leszczynski J.
3.	Aldo-keto reductase may contribute to glyphosate resistance in <i>Lolium rigidum</i>	<i>Pest Management Science</i> . 2023. Vol. 79, No 4. P. 1528–1537.	Zhou F.Y., Han H., Han Y.J., Yu Q., Beckie H.J. et al.
4.	Influence of Chemical Structure of Molecules on Blood–Brain Barrier Permeability on the Pampa Model	<i>Theoretical and Experimental Chemistry</i> . 2022. Vol. 58, No 1. P. 29–33.	Kosinska G.P., Shyrykalova A.O., Burdina Ya.F
5.	A naturally evolved mutation (Ser59Gly) in glutamine synthetase confers glufosinate resistance in plants	<i>Journal of experimental botany</i> . 2022. Vol. 73, No 7. P. 2251–2262.	Zhang C., Yu Q., Han H., Yu C., Tian X. et al.
6.	Decomposition of 2,4,6,-trinitrotoluene (TNT) and 5-nitro-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-one (NTO) by Fe <sub>13</sub> O <sub>13</sub> nanoparticle: density functional theory study.	<i>Environmental science and pollution research</i> . 2022. Vol. 29, No 45. P. 68522–68531.	Ilchenko M., Leszczynski J.
7.	PreS/MD: Predictor of Sensitization Hazard for Chemical Substances Released From Medical Devices	<i>Tox. Sci.</i> 2022. Vol. 189. P. 250–259.	Borba J., Alves V., Braga R., Korn D., Kleinstreuer N. et al.
8.	Integrated approach to elucidate metal-implant related adverse outcome pathways	<i>Res. Toxicol. Pharmacol.</i> 2022. Vol. 36. P. 105277.	Beasley J.M.T., Korn D.R., Popov K.I., Dumproff R.L., Sessions Z.L. et al.

1	2	3	4
9.	NTO Degradation by nitroreductase: A DFT study.	<i>Journal of Physical Chemistry B</i> . 2022. Vol. 126, No 32. P. 5991–6006	Sviatenko L. K., Leszczynski J.
10.	SStopTox: an in Silico Alternative to Animal Testing for Acute Systemic and Topical Toxicity	<i>Environmental health perspectives</i> . 2022. Vol. 130, No 1(2?). P. 027012-1.	Borba J.V.B., Alves V.M., Braga R.C., Korn D.R., Overdahl K. et al.
11.	BeeToxAI: An Artificial Intelligence-Based Web App to Assess Acute Toxicity of Chemicals to Honey bees	<i>Artificial Intelligence in the Life Sciences</i> . 2021. Vol. 1. P. 100013.	Moreira-Filho J.T., Braga R.C., Lemos J.M., Alves V.M., Borba J.V.B. et al.
12.	Novel computational models offer alternatives to animal testing for assessing eye irritation and corrosion potential of chemicals	<i>Artificial Intelligence in the Life Sciences</i> . 2021. Vol. 1. P. 100028.	Silva A.C., Borba J.V.B., Alves V.M., Hall S., Furnham N. et al.
13.	An ABCC-type transporter endowing glyphosate resistance in plants	<i>Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America</i> . 2021. Vol. 118, No 16. e2100136118	Pan L., Yu Q., Wang J., Han H., Mao L. et al.
14.	Catalytic role of solvated electron in the spontaneous degradation of insensitive munition compounds: computational chemistry investigation	<i>Structural Chemistry</i> . 2021. Vol. 32, No. 2. P. 521–527.	Sviatenko L.K., Leszczynska D., Shukla M.K., Leszczynski J.
15.	QSPR models for water solubility of ammonium hexafluorosilicates: analysis of the effects of hydrogen bonds.	<i>Structural Chemistry</i> . 2021. Vol. 32, No 1. P. 309–319.	Gelmboldt V., Shyshkin I.
16.	Chemical safety assessment of transformation products of landfill leachate formed during the Fenton process	<i>Journal of Hazardous Materials</i> . 2021. Vol. 419. P. 126438	Silva L., Alves V.M., Dantas E., Scotti L., Silva W. et al.
17.	Computer-assisted discovery of compounds with insecticidal activity against <i>Musca domestica</i> and <i>Mythimna separate</i>	<i>Food and Chemical Toxicology</i> . 2021. Vol. 147. P. 111899.	Soares Rodrigues G.C., Maia M. D. S., Silva Cavalcanti A.B., Costa Barros R. P., Scotti L. et al.
18.	CATMoS: Collaborative acute toxicity modeling suite	<i>Environmental health perspectives</i> . 2021. Vol. 129, No 4. P. 047013.	Mansouri K., Karmaus A.L., Fitzpatrick J., Patlewicz G., Pradeep P. et al.
19.	Simplex representation of molecular structure as universal QSAR/QSPR tool	<i>Structural Chemistry</i> . 2021. Vol. 32. P. 1365–1392	Hromov A., Kosinskaya A., Stelmakh S., Sessions Z.L.

1	2	3	4
20.	Curated Data In — Trustworthy In Silico Models Out: The Impact of Data Quality on the Reliability of Artificial Intelligence Models as Alternatives to Animal Testing	<i>Alternatives to Laboratory Animals</i> . 2021. Vol. 49, No 3. P. 73–82.	Alves V.M., Auerbach S.S., Kleinstreuer N., Rooney J.P., Rusyn I. et al.
21.	Large-scale modeling of multispecies acute toxicity end points using consensus of multitask deep learning methods	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> . 2021. Vol. 61, No 2. P. 653–663.	Jain S., Siramshetty V., Alves V.M., Kleinstreuer N., Tropsha A. et al.
22.	Selenium and Computational Studies	<i>Mini-Review in Medicinal Chemistry</i> . 2021. Vol. 21, No 4. P. 1865–1887.	Sousa N.F., Scotti L., Scotti M.T.
23.	Quantitative Structure-Activity Relationship Modeling and Docking of Monoterpenes with Insecticidal Activity Against <i>Reticulitermes chinensis</i> Snyder and <i>Drosophila melanogaster</i>	<i>Journal of Agricultural and Food Chemistry</i> . 2020. Vol. 68, No 16. P. 4687–4698.	Rodrigues G.C., Maia M., Scotti L., Scotti M.T.
24.	SCAM detective: accurate predictor of small, colloiddally aggregating molecules	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> . 2020. Vol. 60, No 8. P. 4056–4063.	Alves V.M., Capuzzi S.J., Braga R.C., Korn D., Hochuli J.E. et al.
25.	QSAR Without Borders	<i>Chemical Society Reviews</i> . 2020. Vol. 49, No 11. P. 3525–3564.	Bajorath J., Sheridan R.P., Tetko I.V., Filimonov D., Poroikov V. et al.
26.	Compara: Collaborative modeling project for androgen receptor activity	<i>Environmental health perspectives</i> . 2020. Vol. 128, No 2. P. 027002.	Mansouri K., Kleinstreuer N., Abdelaziz A.M., Alberga D., Alves V.M. et al.
27.	Adsorption of nitrogen-containing compounds on hydroxylated $\alpha$ -quartz surfaces	<i>RSC ADVANCES</i> . 2019. Vol. 9, No 62. P. 36066–36074.	Tsendra O., Boese A.D., Isayev O., Scott A.M., Hill F.C. et al.
28.	Aldo-keto Reductase Metabolizes Glyphosate and Confers Glyphosate Resistance in <i>Echinochloa colona</i>	<i>Plant Physiology</i> . 2019. Vol. 181, No 4. P. 1519–1534.	Pan L., Yu Q., Han H., Mao L., Fan L.J. et al.
29.	Oy Vey! A Comment on “Machine Learning of Toxicological Big Data Enables Read-Across Structure Activity Relationships Outperforming Animal Test Reproducibility	<i>Toxicological sciences</i> . 2019. Vol. 167, No 1. P. 3–4.	Alves V.M., Borba J., Capuzzi S.J., Andrade C.H., Rusyn I. et al.

1	2	3	4
30.	Role of singlet oxygen in the degradation of selected insensitive munitions compounds: A comprehensive, quantum chemical investigation	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> . 2019. Vol. 123, No 35. P. 7597–7608.	Sviatenko L.K., Leszczynska D., Shukla M.K., Leszczynski J.
31.	A density functional theory investigation of degradation of Nitroguanidine in the photoactivated triplet state	<i>Journal of molecular modeling</i> . 2019. Vol. 25, No 12. P. 372	Sviatenko L.K., Leszczynski J., Leszczynska D., Shukla M.K.
32.	Predicting Adverse Drug Effects from Literature- and Database-Mined Assertions	<i>Drug Safety</i> . 2018. Vol. 41, No 11. P. 1059–1072.	La M.K., Sedykh A., Fourches D, Tropsha A.
33.	Chemistry-Wide Association Studies (CWAS): A Novel Framework for Identifying and Interpreting Structure-Activity Relationships	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> . 2018. Vol. 58, No 11. P. 2203–2213.	Low Y.S., Alves V.M., Fourches D., Sedykh A., Andrade C.H. et al.
34.	A Perspective and a New Integrated Computational Strategy for Skin Sensitization Assessment	<i>ACS Sustainable Chemistry &amp; Engineering</i> . 2018. Vol. 6, No 3. P. 2845–2859.	Alves V.M., Capuzzi S.J., Braga R.C., Borba J., Silva A.C. et al.
35.	Multi-Descriptor Read Across (MuDRA): A Simple and Transparent Approach for Developing Accurate Quantitative Structure–Activity Relationship Models	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2018. Vol. 58, No 6. P. 1214–1223.	Alves V.M., Golbraikh A., Capuzzi S.J., Liu K., Lam W. et al.
36.	Chemotext: A Publicly-Accessible, Integrated Cheminformatics Portal	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2018. Vol. 58, No 2. P. 212–218.	Capuzzi S.J., Thornton T.E., Liu K., Baker N., Lam W. et al.
37.	Development of Web and Mobile Applications for Chemical Toxicity Prediction	<i>Journal of the Brazilian Chemical Society</i> . 2018. Vol. 29. P. 982–988.	Alves V.M., Braga R.C., Andrade C.H.
38.	Glyphosate Resistance in <i>Tridax procumbens</i> via a Novel EPSPS Thr-102-Ser Substitution	<i>Journal of Agricultural and Food Chemistry</i> . 2018. Vol. 66, No 30. P. 7880–7888	Li J., Peng Q., Han H., Kulynych T., Yu Q. et al.
39.	Novel $\alpha$ -tubulin mutations conferring resistance to dinitroaniline herbicides in <i>Lolium rigidum</i>	<i>Frontiers in Plant Science</i> . 2018. Vol. 9. P. 97.	Chu Z., Chen J., Han H., Yu Q., Powles S.
40.	Conditional Toxicity Value (CTV) Predictor: An In Silico Approach for Generating Quantitative Risk Estimates for Chemicals	<i>Environmental health perspectives</i> . 2018. Vol. 126, No 5. P. 057008.	Wignall J.A., Sedykh A., Guyton K.Z., Tropsha A., Rusyn I. et al.



1	2	3	4
41.	Chemical toxicity prediction for major classes of industrial chemicals: Is it possible to develop universal models covering cosmetics, drugs, and pesticides?	<i>Food and Chemical Toxicology</i> . 2018. Vol. 112. Pa. 526–534	Alves V.M., Zakharov A., Muratov N.N., Andrade C.H., Tropsha A.
42.	A quantum chemical based toxicity study of estimated reduction potential and hydrophobicity in series of nitroaromatic compounds	<i>SAR and QSAR in Environmental Research</i> . 2017. Vol. 28, No 2. P. 133–150.	Gooch A., Sizochenko N., Sviatenko L., Leszczynski J.
43.	In vivo toxicity of nitroaromatics: A comprehensive quantitative structure–activity relationship study	<i>Environmental toxicology and chemistry</i> . 2017. Vol. 36, No 8. P. 2227–2233.	Gooch A., Sizochenko N., Rasulev B., Leszczynski J.
44.	Pred-Skin: A Fast and Reliable Web Application to Assess SkinSensitization Effect of Chemicals	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2017. Vol. 57, No 5. P. 1013–1017.	Braga R.C., Alves V.M., Strickland J., Kleinstreuer N., Trospsha A. et al.
45.	Phantom PAINS: Problems with the Utility of Alerts for Pan-Assay INterferenceCompoundS.	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2017. Vol. 57, No 3. P. 417–427.	Capuzzi S.J., Tropsha A.
46.	Chembench: A Publicly-Accessible, Integrated Cheminformatics Portal	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2017. Vol. 57, No 2. P. 105–108.	Capuzzi S.J., Kim I.S.J., LamW.I., Thornton T.E., Pozefsky D. et al.
47.	In silicokinetics of alkaline hydrolysis of 1,3,5-trinitro-1,3,5-triazinane (RDX): M06-2X investigation	<i>Environmental Science: Processes &amp; Impacts</i> . 2017. Vol. 19, No 3. P. 388–394.	Sviatenko L.K., Leszczynska D., Shukla M.K., Leszczynski J.
48.	Structure and redox properties of hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) and octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) adsorbed on a silica surface. A DFT M05 computational study	<i>Journal of Chemistry and Technologies</i> . 2017. Vol. 25, No 1. P. 1–8.	Sviatenko L.K., Leszczynski J.
49.	Activity prediction and identification of mis-annotated chemical compounds using extreme descriptors	<i>Journal of Chemometrics</i> . 2016. Vol. 30, No 3. P. 99–108.	Borysov P., Hannig J., Marron J.S., Fourches D., Tropsha A.
50.	Novel Enhanced Applications of QSPR Models: Temperature Dependence of Aqueous Solubility	<i>Journal of Computational Chemistry</i> . 2016. Vol. 37, No 22. P. 2045–2051.	Klimenko K., Shukla M., Vinas N., Perkins E., Polishchuk P. et al.

1	2	3	4
51.	QSAR models of human data can enrich or replace LLNA testing for human skin sensitization	<i>Green Chemistry</i> . 2016. Vol. 18, No 24. P. 6501–6515.18.	Alves V.M., Capuzzi S.J., Braga R.C., Thornton T.E., Fourches D. et al.
52.	Structural and physico- chemical interpretation (SPCI) of QSAR models and its comparison with MMP analysis	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> . 2016. Vol. 56, No 8. P. 1455–1469.	Polishchuk P., Tinkov O., Khristova T., Kosinskaya A., Varnek A.
53.	QSAR Modeling and Prediction of Drug-Drug Interactions	<i>Molecular Pharmaceutics</i> . 2016. Vol. 13, No 2. P. 545–556.	Zakharov A.V., Varlamova E.V., Lagunin A.A., Dmitriev A.V., Fourches D. et al.
54.	Alarms About Structural Alerts	<i>Green Chemistry</i> . 2016. Vol. 18, No 16. P. 4348–4360.	Alves V.M., Capuzzi S.J., Politi R., Low Y., Braga R.C. et al.
55.	Trust, But Verify II: A Practical Guide to Chemogenomics Data Curation.	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2016. Vol. 56, No7. P. 1243–1252.	Fourches D., Tropsha A.
56.	CERAPP: Collaborative Estrogen Receptor Activity Prediction Project	<i>Environmental health perspectives</i> . 2016. Vol. 124, No 7. P. 1023–1033.	Mansouri K., Abdelaziz A., Rybacka A., Roncaglioni A., Tropsha A. et al.
57.	Modelling of compound combination effects and applications to efficacy and toxicity: state-of-the-art, challenges and perspectives	<i>Drug Discovery Today</i> . 2016. Vol. 21, No 2. P. 225–238.	Bulusu K.C., Guha R., Mason D.J., Lewis R., Motamedi Ya.K. et al.
58.	Adsorption of 2,4,6,8,10,12-hexanitro-2,4,6,8,10,12-hexaazaisowurtzitane (CL-20) on a soil organic matter. A DFT M05 computational study	<i>Chemosphere</i> . 2016. Vol. 148. P. 294–299.	Sviatenko L.K., Shukla M.K., Seiter J.M., Leszczynska D., Leszczynski J.
59.	Computational assessment of environmental hazards of nitroaromatic compounds: influence of the type and position of aromatic ring substituents on toxicity	<i>Structural Chemistry</i> . 2016. Vol. 27, No 1. P. 191–198.	Tinkov O.V., Kosinskaya A.P., Muratov N.N., Hill F.C., Leszczynski J.
60.	In silico alkaline hydrolysis of octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine: Density functional theory investigation	<i>Environmental Science &amp; Technology</i> . 2016. Vol. 50, No 18. P. 10039–10046.	Sviatenko L.K., Hill F.C., Leszczynska D., Shukla M.K., Hovorun D. et al.

1	2	3	4
61.	Radical decomposition of 2,4-dinitrotoluene (DNT) at conditions of advanced oxidation. Computational study	<i>Journal of Chemistry and Technologies</i> . 2016. Vol. 24, No 2. P. 56–61.	Sviatenko L.K., Leszczynski J.
62.	Two-electron reduction of nitroaromatic compounds by flavin mononucleotide. DFT computational study	<i>Journal of Chemistry and Technologies</i> . 2016. Vol. 24, No 1. P. 1–6.	Sviatenko L.K., Leszczynski J.
63.	Theoretical study on alkaline hydrolysis of trinitrotoluene: later steps	<i>Journal of Chemistry and Technologies</i> . 2015. Vol. 23, No 1. P. 1–7.	Sviatenko L.K., Leszczynski J.
64.	Sviatenko L. K., Gorb L., Okovytyy S. Structure and redox properties of 2,4,6,8,10,12-hexanitro-2,4,6,8,10,12-hexaazaisowurtzitane (CL-20) adsorbed on a silica surface. M05 computational study.	<i>Bulletin of Dnipropetrovsk University. Series Chemistry JOURNAL of chemistry and technologies</i> . 2015. Vol. 23, No 2. P. 1–9.	Sviatenko L.K.
65.	Structure and redox properties of 5-amino-3-nitro-1H-1,2,4-triazole (ANTA) adsorbed on a silica surface: A DFT M05 computational study	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> . 2015. Vol. 119, No 29. P. 8139–8145.	Sviatenko L.K., Hill F.C., Leszczynska D., Leszczynski J.
66.	Are the reduction and oxidation properties of nitrocompounds dissolved in water different from those produced when adsorbed on a silica surface? An DFT M05-2X computational study	<i>Journal of Computational Chemistry</i> . 2015. Vol. 36, No 14. P. 1029–1035.	Sviatenko L.K., Isayev O., Hill F.C., Leszczynska D., Leszczynski J.
67.	Alkaline hydrolysis of hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine: M06-2X investigation	<i>Chemosphere</i> . 2015. Vol. 134. P. 31–38.	Sviatenko L.K., Hill F.C., Leszczynska D., Leszczynski J.
68.	Predicting chemically-induced skin reactions. Part I: QSAR models of skin sensitization and their application to identify potentially hazardous compounds	<i>Toxicology and Applied Pharmacology</i> . 2015. Vol. 284, No 2. P. 262–272.	Alves V.M., Fourches D., Strickland J., Kleinstreuer N., Andrade C.H. et al.
69.	Pred-hERG: A Novel web-Accessible Computational Tool for Predicting Cardiac Toxicity	<i>Molecular Informatics</i> . 2015. Vol. 34, No 10. P. 698–701.	Braga R.C., Alves V.M., Silva M., Fourches D., Lião L.M. et al.
70.	Curation of chemogenomics data.	<i>Nature chemical Biology</i> . 2015. Vol. 11, No 8. P. 535.	Fourches D., Tropsha A.
71.	Predicting chemically-induced skin reactions. Part II: QSAR models of skin permeability and the relationships between skin permeability and skin sensitization	<i>Toxicology and Applied Pharmacology</i> . 2015. Vol. 284, No 2. P. 273–280.	Alves V.M., Fourches D., Strickland J., Kleinstreuer N., Andrade C.H. et al.

1	2	3	4
72.	In silico kinetics and mechanism of an interaction of cis-2-butene-1,4-dial with 2'-deoxycytidine	<i>Chemical Research in Toxicology</i> . 2014. Vol. 27, No 6. P. 981–989.	Sviatenko L.K., Hovorun D., Leszczynski J.
73.	Theoretical study of one-electron reduction and oxidation potentials of N-heterocyclic Compounds	<i>Chemistry of Heterocyclic Compounds</i> . 2014. Vol. 50, No 3. P. 311–318.	Sviatenko L.K., Hill F.C., Leszczynska D., Leszczynski J.
74.	Comprehensive investigations of kinetics of alkaline hydrolysis of TNT (2,4,6-trinitrotoluene), DNT (2,4-dinitrotoluene) and DNAN (2,4-dinitroanisole)	<i>Environmental Science &amp; Technology</i> . 2014. Vol. 48, No 17. P. 10465-10474.	Sviatenko L., Kinney C., Hill F.C., Bednar A.J., Leszczynski J.
75.	From basic physics to mechanisms of toxicity: The “liquid drop” approach applied to develop predictive classification models for toxicity of metal oxide nanoparticles	<i>Nanoscale</i> . 2014. Vol. 6, No 22. P. 13986–13993.	Sizochenko N., Rasulev B., Gajewicz A., Puzyn T., Leszczynski J.
76.	Tuning hERG Out: Antitarget QSAR Models for Drug Development	<i>Current topics in medicinal chemistry</i> . 2014. Vol. 14, No 11. P. 1399–1415.	Braga R.C., Alves V.M., Silva M., Fourches D., Tropsha A. et al.
77.	QSAR modeling: where have you been? Where are going to?	<i>Journal of medicinal chemistry</i> . 2014. Vol. 57, No 12. P. 4977–5010.	Cherkasov A., Fourches D., Varnek A., Baskin I.I., Cronin M. et al.
78.	Dataset Modelability by QSAR	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2014. Vol. 54, No 1. P. 1–4.	Golbraikh A., Fourches D., Tropsha A.
79.	Adsorption of nitrogen-containing compounds on the (100) $\alpha$ -quartz surface: Ab initio cluster approach	<i>Journal of Physical Chemistry C</i> . 2014. Vol. 118, No 6. P. 3023–3034.	Tsendra O, Michalkova Scott A., Boese D., Hill F.C., Ilchenko M.M. et al.
80.	Interaction of 2'-deoxyguanosine with cis-2-butene-1,4-dial: Computational approach to analysis of multistep chemical reactions	<i>Biopolymers and Cell</i> . 2014. Vol. 30, No 3. P. 239–246.	Sviatenko L.K., Hovorun D.M., Leszczynski J.
81.	Structural mechanisms of interaction of cyanolcrylates with plant tubulin.	<i>Cytology and Genetics</i> . 2014. Vol. 48, No. 1. P. 7–14.	Blume Ya.B.
82.	Theoretical study of ionization and one-electron oxidation potentials of N-heterocyclic compounds	<i>Journal of computational chemistry</i> . 2013. Vol. 34, No 13. P. 1094–1100.	Sviatenko L.K., Hill F.C., Leszczynski J.
83.	Universal Approach for Structural Interpretation of QSAR/QSPR Models	<i>Molecular Informatics</i> . 2013. Vol. 32, No 9–10. P. 843–853.	Polishchuk P.G.

1	2	3	4
84.	Nonexperimental screening of the water solubility, lipophilicity, bioavailability, mutagenicity and toxicity of various pesticides with QSAR models aid	<i>Chemistry Journal of Moldova</i> . 2013. Vol. 8, No 1. P. 95–100.	Kolumbin O, Polischuk P., Kulinsky M., Bobeica V.
85.	QSPR Prediction of Lipophilicity for Organic Compounds Using Random Forest Technique on the Basis of Simplex Representation of Molecular Structure	<i>Molecular Informatics</i> . 2012. Vol. 31, No 3–4. P. 273–280.	Hill F.C., Polischuk P.G., Leszczynski J.
86.	Interaction of 2'-deoxyadenosine with cis-2-butene-1,4-dial: Computational approach to analysis of multistep chemical reactions	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> . 2012. Vol. 116, No 9. P. 2333–2342.	Sviatenko L.K., Hovorun D., Leszczynski J.
87.	DFT M06-2X investigation of alkaline hydrolysis of nitroaromatic compounds	<i>Chemosphere</i> . 2012. Vol. 88, No 5. P. 635–643.	Hill F.C., Sviatenko L.K., Blaustein G.S., Leszczynski J.
88.	Existing and Developing Approaches for QSAR Analysis of Mixtures	<i>Molecular Informatics</i> . 2012. Vol. 31, No 3–4. P. 202–221.	Varlamova E.V., Polishchuk P.G.
89.	Does Rational Selection of Training and Test Sets Improve the Outcome of QSAR Modeling?	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2012. Vol. 52, No 10. P. 2570–2578.	Martin T.M., Harten P., Young D.M., Golbraikh A., Zhu H. et al.
90.	In silico structure–function analysis of <i>E. cloacae</i> nitroreductase	<i>Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics</i> . 2012. Vol. 80, No 12. P. 2728–2741.	Isayev O., Crespo-Hernández C.E., Hill F.C., Leszczynski J.
91.	Predictions of Gibbs free energies for the adsorption of polyaromatic and nitroaromatic environmental contaminants on carbonaceous materials: efficient computational approach	<i>Langmuir</i> . 2012. Vol. 28, No 37. P. 13307–13317.	Michalkova Scott A., Mobley E.A., Hill F.C., Leszczynski J.
92.	QSPR approach to predict nonadditive properties of mixtures. Application to bubble point temperatures of binary mixtures of liquids	<i>Molecular Informatics</i> . 2012. Vol. 31, No 6–7. P. 491–502.	Oprisiu I., Varlamova E., Marcou G., Polishchuk P., Varnek A.
93.	Interpretation of QSAR models based on random forest methods	<i>Molecular Informatics</i> . 2011. Vol. 30, No 6–7. P. 593–603.	Polishchuk P.G., Andronati S.A.
94.	Predicting drug-induced hepatotoxicity using QSAR and toxicogenomics approaches	<i>Chemical Research in Toxicology</i> . 2011. Vol. 24, No 8. P. 1251–1262.	Low Y., Uehara T., Minowa Y., Yamada H., Ohno Y. et al.

1	2	3	4
95.	Evaluation of the dependence of aqueous solubility of nitro compounds on 2 temperature and salinity: A COSMO-RS simulation	<i>Chemosphere</i> . 2011. Vol. 83, No 3. P. 287–294.	Kholod Y.A., Gryn'ova G., Hill F.C., Leszczynski J.
96.	QSAR analysis of the toxicity of nitroaromatics in <i>Tetrahymena pyriformis</i> : structural factors and possible modes of action	<i>SAR and QSAR in Environmental Research</i> . 2011. Vol. 22, No 5–6. P. 575–601.	Muratov N.N., Varlamova E.V., Kuz'mina A.V., Golius A., Hill F.C. et al. .
97.	Toward robust computational electrochemical predicting the environmental fate of organic pollutants	<i>Journal of Computational Chemistry</i> . 2011. Vol. 32, No 10. P. 2195–2203.	Sviatenko L., Isayev O., Hill F., Leszczynski J.
98.	Can the Gibbs free energy of adsorption be predicted efficiently and accurately: an M05-2X DFT study	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> . 2011. Vol. 115, No 11. P. 2423–2430.	Michalkova A., Hill F., Leszczynski J.
99.	Reconstruction of the spatial structure of plant phosphatases types 1 and 2A in complexes with okadaic acid	<i>Cytology and Genetics</i> . 2011. Vol. 45, No 3. P. 153–162.	Samofalova D.A., Karpov P.A., Blume Ya.B.
100.	Exploration of density functional methods for one-electron reduction potential of nitrobenzenes	<i>Journal of computational chemistry</i> . 2010. Vol. 31, No 1. P. 144–150.	Zubatyuk R.I., Shishkin O.V., Qasim M., Leszczynski J.
101.	New QSPR equations for prediction of aqueous solubility for military compounds	<i>Chemosphere</i> . 2010. Vol. 79, No 8. P. 887–890.	Kovdienko N.A., Hill F.C., Leszczynski J.
102.	Application of Random Forest and Multiple Linear Regression Techniques to QSPR Prediction of an Aqueous Solubility for Military Compounds	<i>Molecular Informatics</i> . 2010. Vol. 29, No 5. P. 394–406.	Kovdienko N.A., Polishchuk P.G., Hill F.C., Leszczynski J.
103.	Applicability Domains for Classification Problems: Benchmarking of Distance to Models for Ames Mutagenicity Set	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2010. Vol. 50, No12. P. 2094–2111.	Sushko I., Novotarskyi S., Körner R., Pandey A., Cherkasov A. et al.
104.	Trust, But Verify: On the Importance of Chemical Structure Curation in Cheminformatics and QSAR Modeling Research.	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2010. Vol. 50, No 7. P. 1189–1204.	Fourches D., Tropsha A.
105.	Exposure of beta-tubulin regions defined by antibodies on an <i>Arabidopsis thaliana</i> microtubule protofilament model and in the cells	<i>BMC Plant Biology</i> . 2010. Vol. 10, No 29.	Blume Y. B, Yemets A. I., Sheremet Ya. O., Sulimenko V., Sulimenko T. et al.
106.	Application of Quantum Chemical Approximations to Environmental Problems: Prediction of Water Solubility for Nitro Compounds	<i>Environmental Science &amp; Technology</i> . 2009. Vol. 43, No 24. P. 9208–9215.	Kholod Ya.A., Hill F.C., Qasim M., Leszczynski J.

1	2	3	4
107.	Consensus QSAR Modeling of Phosphor-Containing Chiral AChE Inhibitors	<i>QSAR &amp; Combinatorial Science</i> . 2009. Vol. 28, No 6–7. P. 664–677.	Varlamova E.V., Wang J., Leszczynski J.
108.	Application of Random Forest Approach to QSAR Prediction of Aquatic Toxicity	<i>Journal of chemical information and modeling</i> . 2009. Vol. 49, No 11. P. 2481–2488.	Polishchuk P.G., Kolumbin O.G., Muratov N.N.,
109.	Structural and biological characterization of the tubulin interaction with dinitroanilines	<i>Cytology and Genetics</i> . 2009. Vol. 43, No 4. P. 267–282.	Yemets A.I., Brytsun V.N., Lozinsky M.O., Blume Y.B.
110.	CL-20 photodecomposition: Ab initio foundations for identification of products	<i>Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy</i> . 2008. Vol. 71, No 1. P. 230–237.	Kholod Ya., Kosenkov D., Qasim M., Leszczynski J.
111.	The effects of characteristics of substituents on toxicity of the nitroaromatics: HiT QSAR study	<i>Journal of Computer-Aided Molecular Design</i> . 2008. Vol. 22, No 10. P. 747–759.	Qasim M., Leszczynski J.
112.	Ab Initio Molecular Dynamics Study on the Initial Chemical Events in Nitramines: Thermal Decomposition of CL-20	<i>Journal of physical chemistry B</i> . 2008. Vol. 112, No 35. P. 11005–11013.	Isayev O., Qasim M., Leszczynski J.
113.	Hierarchical QSAR technology based on the Simplex representation of molecular structure.	<i>Journal of Computer - aided Molecular design</i> . 2008. Vol. 22, No 6. P. 403–421.	
114.	The effect of nitroaromatics composition on their toxicity in vivo: novel, efficient non-additive 1D QSAR analysis	<i>Chemosphere</i> . 2008. Vol. 72, No 9. P. 1373–1380.	Qasim M., Leszczynski J.
115.	Structure-toxicity relationships of nitroaromatic compounds	<i>Molecular diversity</i> . 2006. Vol. 10, No 2. P. 233–245.	Isayev O., Rasulev B., Leszczynski J.
116.	Construction of three-dimensional models of Arabidopsis thaliana FtsZ-proteins on basis of crystal structure of archaeobacterial FtsZ-GDP.	<i>Cytology and Genetics</i> . 2006. Vol. 40, No 1. P. 10–20.	Demchuk O. N., Blume Ya. B.
117.	Hierarchic system of QSAR models (1D-4D) on the base of simplex representation of molecular structure	<i>Journal of Molecular Modeling</i> . 2005. Vol. 11, No 6. P. 457–467.	Polischuk P.G., Hromov A.I., Liahovskiy A.V., Andronati S.A., Makan S.Yu.
118.	Modeling the gas-phase reduction of nitrobenzene to nitrosobenzene by iron monoxide: A density functional theory study	<i>Journal of Physical Chemistry A</i> . 2004. Vol. 108, No 22. P. 4878–4886.	Zilberberg I., Ilchenko M., Isayev O., Leszczynski J.
119.	Analysis of structural features of plant $\alpha$ -tubulin that provide increased resistance to cold.	<i>Cytology and genetics</i> . 2003. Vol. 37, No 6. P. 3–11.	Demchuk ON, Blume Ya. B.

1	2	3	4
120.	Cold adaptation of plant microtubules: structural interpretation of primary sequence changes in a highly conserved region of $\alpha$ -tubulin.	<i>Cell Biology International</i> . 2003. Vol. 27, No 3. P. 241–243.	Demchuk O.N., Blume Ya.B.
121.	Structural modelling of the interaction of plant $\alpha$ -tubulin with dinitroaniline and phosphoramidate herbicides	<i>Cell Biology International</i> . 2003. Vol. 27, No 3. P. 171–174.	Blume Ya.B., Yemets A.I., Baird W.V.
122.	Comparative analysis of primary structure of the mutant tubulins with resistance to antimicrotubular drugs for prediction of new mutations with analogous properties.	<i>Cytology and Genetics</i> . 2003. Vol. 37, No 2. P. 69–78.	Zhivolup A.N., Blume Ya. B.
123.	Are earlier predicted sites of different plant tubulins involved in interaction with dinitroanilines?	<i>Molecular Biology of the cell</i> . 2002. Vol. 13. P. 463a.	Blume Ya.B., Yemets A.I., Baird W.V.
124.	Comparative analysis of the tubulin secondary structure.	<i>Biopolymers and Cell</i> . 2001. Vol. 17, No 1. P. 61–69.	Blume Ya.B.
125.	Structure modelling of the COOH-terminal cytokine-like module of the mammalian cytoplasmic tyrosyl-tRNA synthetase	<i>Biopolymers and Cell</i> . 2000. Vol. 16, No 6. P. 515–524.	Golub A.G., Odynets K.A., Konelyuk A.I.
126.	Identification and analysis of interactive sites of plant tubulin for dinitroanilines and phosphoramidates.	<i>Molecular Biology of the cell</i> . 2000. Vol. 11. P. 190a.	Yemets A.I., Blume Ya.B.
<b>III. Статті у наукових виданнях, включених до категорії "Б"</b>			
1.	2D QSAR аналіз проникаючої здатності органічних сполук відносно поверхні гематоенцефалічного бар'єру.	<i>Вісник ОНУ, серія Хімія</i> . 2022. Т. 27, № 3(83). С.13–20.	Косінська Г.П., Сідельникова Т.А., Бурдіна Я.Ф., Ширікалова А.О., Степанов Г.Ф. та ін.
2.	QSPR аналіз температурної залежності розчинності органічних сполук у воді	<i>Вісник ОНУ, серія Хімія</i> . 2012. Т. 17, №2 (42). С.32–40.	Кліменко К. О.
<b>Патенти на корисну модель України</b>			
1.	Комп'ютерна програма «Експертна система «TransProp Ехpert» для прогнозування термодинамічних транспортних властивостей (коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності) органічних сполук»	Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір (комп'ютерна програма) №111479. заявл. 31.01.2022; опубл. 31.03.2022. Бюл. № 69	Недоступ В. І.



1	2	3	4
2.	Комп'ютерна програма "Программный комплекс для решения задач структура-свойство "HIT QSAR"	Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір (комп'ютерна програма) №66633. заявл. 13.07.2016; опубл. 28.10.2016. Бюл. № 42.	

Дисертації			
	Автор, назва дисертації	Вихідні дані	Науковий керівник/ або консультант
1.	Стельмах С. І. Аналіз та прогнозування властивостей молекулярних нанооб'єктів методами хемоінформатики	дис. ... д-ра філософії: 102 - Хімія. Одеса, 2021. 127 с	член-кор. НАН України, д.х.н. Кузьмін В.Є.
2.	Мурадова А.С. Таутомерні і конформаційні переходи у нуклеотидній парі основ G.C: квантово-хімічне дослідження	дис. ... д-ра філософії: 091- Біологія. Київ, 2021. 141 с.	к.б.н., доцент Нипорко О.Ю.
3.	Святенко Л. К. Реакційна здатність нітроароматичних сполук і циклічних нітроамінів. Квантово-хімічне моделювання	дис. ... д-ра хім. наук : 02.00.03. Харків, 2021. 392 с.	д.х.н., проф. Оковитий С.І.
4.	Косінська Г. П. Структурні фактори молекул, що визначають їх здатність проникнення через гематоенцефалічний бар'єр	дис. ... канд. біол. наук : 02.00.10. Київ, 2021. 178 с.	член-кор. НАН України, д.х.н. Кузьмін В.Є.
5.	Klimenko K. Computer-aided drug design of broad-spectrum antiviral compounds	Doctoral thesis in Chimie . Strasbourg, 2017. 163 p.	Under the supervision of Victor Kuz'min
6.	Мокшина О. Г. Критичні властивості та другі віріальні коефіцієнти органічних речовин та їх сумішей. QSPR аналіз з урахуванням міжмолекулярних взаємодій	дис. ... канд. хім. наук : 02.00.03. Одеса, 2016. 184 с.	д.х.н., проф. Кузьмін В.Є.
7.	Ларіонов В. Б. Фармакологічний аналіз проникності гематоенцефалічного бар'єру у стратегії розробки нейродоступних сполук	дис. ... д-ра біол. наук : 14.03.05. Одеса, 2015. 397 с.	академік НАМН України Головенко М.Я., д.х.н., проф. Кузьмін В.Є.
8.	Борисюк І. Ю. Фармакокінетичний та біофармацевтичний аналіз біодоступності лікарських засобів з різними механізмами всмоктування (експериментальні дослідження та комп'ютерне моделювання)	дис. ... д-ра фарм. наук : 14.03.05. Харків, 2014. 315 с.	академік НАМН України Головенко М.Я., д.х.н., проф. Кузьмін В.Є.
9.	Варламова К. В. Прогнозування властивостей сумішей сполук методами QSAR/QSPR на основі симплексного подавання молекулярної структури	дис. ... канд. хім. наук : 02.00.03. Одеса, 2013. 167 с.	д.х.н., проф. Кузьмін В.Є.

10.	Нипорко О. Ю. Особливості просторової структури тубуліну як основа клітинної відповіді рослин на дію гербіцидів динітроанілінового та фосфороамідного рядів	дис... канд. біол. наук : 03.00.11. Київ, 2006. 153 с.	член-кор. НАН України, д.б.н. Блюм Я.Б.
11.	Муратов Є. Н. Кількісна оцінка впливу структурних факторів на властивості макрогетероциклів, що містять нітроген, оксиген та сульфур	дис. ... канд. хім. наук : 02.00.03. Одеса, 2004. 202 с.	к.х.н., старший науковий співробітник Кузьмін В.Є.
12.	Огніченко Л. М. Концепція інформаційного поля молекул та її застосування для вирішення завдань "структура-властивість" органічних сполук	дис. ... канд. хім. наук : 02.00.03. Одеса, 2004. 158 с.	к.х.н., старший науковий співробітник Кузьмін В.Є.
13.	Кузьмін В. Є. Топологічні та конформаційні аспекти функціонування макрогетероциклів	дис. ... д-ра хім. наук : 02.00.03. Одеса, 2004. 244 с.	член-кор. НАН України Камалов Г.Л.
14	Артеменко А. Г. Аналіз зв'язку структура-властивість на основі молекулярних ґраткових моделей:	дис. ... канд. хім. наук : 02.00.03. Одеса, 2000. 153 с.	к.х.н., старший науковий співробітник Кузьмін В.Є.

Кількість вітчизняних наукових проєктів та грантів, за якими працював претендент	як науковий керівник	як виконавець
	8	13
Кількість закордонних наукових проєктів та грантів, за якими працював претендент	як науковий керівник	як виконавець
	8	28