



**НИКОЛАЙ СЕРАФИМОВИЧ ЗЕФИРОВ**

**К 75-летию со дня рождения**

Выдающийся ученый в области органической, математической и медицинской химии Николай Серафимович Зефирин родился 13 сентября 1935 г. в Ярославле. В 1958 г. Николай Серафимович окончил химический факультет Московского государственного университета с "красным дипломом". Он стал доктором химических наук (1966 г.), профессором (1973 г.) и зав. кафедрой органической химии химфака МГУ (с 1993 г. по настоящее время), член-корреспондентом РАН (1981 г.), академиком РАН (1987 г.). Н. С. Зефирин – академик Международной академии математической химии, академик Международной академии информатики, академик Российской Академии Естественных наук, член Международной академии "Собрание по использованию иода", заслуженный профессор МГУ им. М. В. Ломоносова, почетный профессор ряда ведущих университетов Европы и США, почетный академик АН Республики Башкортостан. Н. С. Зефирин награжден государственными орденами и медалями, удостоен Государственной Премии СССР, Премии Правительства РФ в области науки и техники (2002 г.), Бутлеровской и Ломоносовской премиями и др. В течение многих лет академик Н. С. Зефирин был директором, а в настоящее время является научным руководителем Института физиологически активных веществ РАН.

Академик Н. С. Зефирин – признанный мировой лидер в области

органической и математической химии, он входит в число наиболее цитируемых химиков. Его вклад в развитие органического синтеза трудно переоценить: открыты серии новых реакций электрофильного присоединения, новые классы органических соединений (триангуланы, органические перхлораты, гетероадамантаны и др.), новые уникальные реагенты (гипервалентные соединения иода, селена, теллура, нитро-сульфаты и др.), открыто новое явление нуклеофильности нуклеофугных анионов. Н. С. Зефириным основана российская школа математической химии и компьютерного молекулярного дизайна. Им развиты методы математической химии в приложении к проблемам медицинской химии, что позволило осуществить молекулярное моделирование рецепторов человека и планировать синтез инновационных лекарственных препаратов нового поколения. В последние годы им осуществлен синтез новых классов гетероциклов, напряженных полициклопропановых структур, синтез принципиально новых реагентов, например полинитрометанов для синтеза нитрозамещенных гетероциклов, открыты универсальные катализаторы для ряда процессов, новые перегруппировки, развита концепция молекулярного подобию для прогнозирования свойств химических соединений и для молекулярного моделирования рецепторов центральной нервной системы человека, например моделирование открытой и закрытой форм ГАМК<sub>A</sub> рецептора и механизма его активации, создан математический аппарат для поиска структур с целевыми заранее заданными свойствами, осуществлен синтез веществ с противоопухолевой активностью, разработан метод синтеза фосфорсодержащих олигопептидов, синтез полиспироциклических аминокислот циклопропанового ряда, псевдо-γ-глутамилпептидов, изучена острая и отставленная нейротоксичность в ряду фосфорилированных оксимов, созданы аллостерические модуляторы AMPA-рецепторов, фармакологически активные 3,7-диазабицикло[3.3.1]нонаны, гидрированные пиридо(4,3-*b*)индолы, улучшающие когнитивные функции и память, разработаны новые антинеопласты с проапоптотическим действием и др.

Н. С. Зефирин является инициатором изучения медицинской химии в России, по его инициативе на химическом факультете МГУ создана новая специальность "Медицинская химия".

В научной школе академика Н. С. Зефирова на химическом факультете МГУ и ИФАВ РАН выполнено и защищено более ста кандидатских и более двадцати докторских диссертаций.

Н. С. Зефириным опубликовано более 1600 научных трудов, получено более 100 авторских свидетельств и патентов.

Параллельно с научно-педагогической деятельностью академик Н. С. Зефирин ведет активную научно-организационную работу. Он много лет руководит учеными и диссертационными советами, комиссиями и секциями РАН, РХО им. Д. И. Менделеева, отраслевых министерств и др. Международное признание заслуг Н. С. Зефирова выражается и в том, что он является членом редколлекции наиболее престижных научных журналов

*Химия гетероциклических соединений, Tetrahedron Asymmetry, Chemical Information and Comput. Science, Sulfur Reports, Sulfur Letters, Current Topics in Medical Chemistry* и др.

Николай Серафимович открытый, отзывчивый, доброжелательный, эрудированнейший и принципиальный ученый, пользуется глубочайшим уважением, любовью и авторитетом.

В год своего 75-летнего юбилея Николай Серафимович Зефирин продолжает активную, насыщенную творческую деятельность, является образцом и примером для учеников, сотрудников и коллег.

Много лет Николай Серафимович был членом редколлегии нашего журнала, ныне – член редакционного совета, он и его сотрудники – постоянные наши авторы.

Мы сердечно поздравляем дорогого юбиляра, желаем новых творческих успехов и достижений, новых идей и их реализации, радости исполнения замыслов, самоотверженных помощников и учеников, крепкого здоровья и долгих, счастливых лет жизни и надеемся на продолжение нашего сотрудничества.

**Редколлегия**

---

---

**Список важнейших публикаций академика РАН Н. С. Зефи́рова  
за период 2006–2010 гг.**

1. V. I. Chupakhin, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Modeling the open and closed forms of GABA<sub>A</sub> receptor: analysis of ligand-receptor interactions for the GABA-binding site, *Dokl. Biochem. Biophys.*, **408**, 169–174 (2006).
2. E. B. Averina, R. R. Karimov, K. N. Sedenkova, Yu. K. Grishin, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Carbenoid rearrangement of *gem*-dihalogenospiropentanes, *Tetrahedron*, **62**, 8814–8821 (2006).
3. E. V. Averina, N. V. Yashin, Yu. K. Grishin, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Synthesis of (±)-(2-methylenecyclopropyl)glycine and (±)-4-[amino(carboxymethyl)]-spiro[2.2]pentane-1-carboxylic acid, *Synthesis*, 880–884 (2006).
4. Р. А. Газзаева, А. Н. Федотов, Е. В. Трофимова, О. А. Попова, С. С. Мочалов, Н. С. Зефи́ров, О синтезе *o*-нитроацилбензолов из *o*-нитрозамещённых бензиловых спиртов и их производных, *ЖОрХ*, **42**, 94–106 (2006).
5. E. M. Budylnina, O. A. Ivanova, E. V. Averina, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Ring opening of 1,1-dinitrocyclopropane by addition of C, N, O and S nucleophiles, *Tetrahedron Lett.*, **47**, 647–649 (2006).
6. А. Н. Захаров, Н. С. Зефи́ров, Каталитические свойства моно- и олигомерных хелатов меди(II) на основе фенилгидразина, закреплённого на цеолите с помощью топологического якоря, *ЖОХ*, **76**, 1411–1420 (2006).
7. Н. В. Зык, А. Ю. Гаврилова, О. А. Мухина, О. Б. Бондаренко, Н. С. Зефи́ров, Эфиры сульфеновой кислоты – перспективные сульфенилирующие реагенты, *ЖОрХ*, **42**, 1865–1866 (2006).
8. Н. В. Зык, А. О. Гаврилова, О. А. Мухина, О. Б. Бондаренко, Н. С. Зефи́ров, Галогентриметилсиланы как активирующие сореагенты в реакциях сульфенилирования олефинов, *Изв. АН, Сер. хим.*, 1798–1799 (2006).
9. Е. В. Радченко, В. А. Палюлин, Н. С. Зефи́ров, Локальные молекулярные характеристики в анализе количественной связи "структура–активность", *Рос. хим. журн.*, **100**, 76–85 (2006).
10. А. В. Иванов, П. А. Сви́нарева, И. В. Жуков, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефи́ров, Новые фталоцианиновые комплексы редкоземельных элементов на основе 4,5-изопропилидендиоксифталонитрила, *Изв. АН, Сер. хим.*, 274–279 (2006).
11. В. В. Калашников, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефи́ров, Удобный путь синтеза 9,10-дициан-1,2,3,4,5,6,7,8-октагидрофенантрена, *ЖОХ*, **76**, 346–347 (2006).
12. М. И. Лавров, В. А. Палюлин, Н. С. Зефи́ров, *Конструирование и синтез аллостерических модуляторов АМРА-рецепторов. XIII Российский национальный конгресс "Человек и лекарство", 3–7 апреля, в кн.: Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2006, с. 24.
13. О. А. Ivanova, E. M. Budylnina, E. V. Averina, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Application of a thermal  $\beta$ -elimination reaction to N-alkoxy-3,3-dinitroisoxazolidines: Synthesis of 3-nitroisoxazolines, *Synthesis*, 706–710 (2006).

14. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, М. В. Присяжной, Н. С. Зефилов, Кетоны в каталитическом трикомпонентном "one-pot" синтезе  $\alpha$ -аминофосфонатов по реакции Кабачника–Филдса, *Изв. АН, Сер. хим.*, 1164–1169 (2006).
15. Е. Д. Матвеева, Н. С. Зефилов, Аминокислоты в каталитическом трикомпонентном синтезе производных  $\alpha$ -аминофосфонатов, *ЖОрХ*, **42**, 1254–1255 (2006).
16. С. С. Мочалов, П. И. Гаджиева, Н. С. Зефилов, Т. А. Воронина, Л. Н. Неробкова, Т. А. Гудашева, 6-(4'-Хлорбензоил)-7-(N-4"-нитробензоил)амино-1,4-бензодиоксан и его аналоги, обладающие противосудорожной активностью, Пат. России № 02277091 (2006).
17. E. D. Matveeva, M. V. Proskurnina, N. S. Zefirov, Polyvalent iodine in organic chemistry: recent development, 2002–2006, *Heteroat. Chem.*, **17**, 595–617 (2006).
18. М. И. Скворцова, И. В. Станкевич, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Концепция молекулярного подобия и её использование для прогнозирования свойств химических соединений, *Успехи химии*, **75**, 1074–1093 (2006).
19. Ю. В. Скорняков, М. В. Проскурнина, Н. С. Зефилов, Синтез циклопропенонов. *Успехи органического катализа и химии гетероциклов*, Химия, Москва, 2006, 141–168.
20. А. О. Толбин, В. Е. Пушкарев, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефилов, Синтез и спектральные свойства новых планарных биядерных фталоцианинов с общим бензольным кольцом, *Изв. АН, Сер. хим.*, 1112–1115 (2006).
21. Д. А. Шульга, А. А. Олиференко, С. А. Писарев, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Моделирование атомных RESP-зарядов с помощью топологических схем расчёта, *ДАН*, **408**, 340–343 (2006).
22. A. Yu. Tolbin, V. E. Pushkarev, L. G. Tomilova, N. S. Zefirov, Preparation and spectral properties of new planar binuclear phthalocyanines sharing one benzene ring, *J. Porphyrins Phtalocyanines*, **10**, 900 (2006).
23. L. G. Tomilova, A. Yu. Tolbin, V. E. Pushkarev, M. O. Breusova, N. S. Zefirov, Synthesis and investigation of new phthalocyanines and their analogues, *J. Porphyrins Phtalocyanines*, **10**, 516 (2006).
24. S. S. Tratch, M. S. Molchanova, N. S. Zefirov, New approaches to degenerate interconversions of organic structures. 1. Levels of structural degeneracy and computer-aided search for degenerate rearrangements, *Croat. Chem. Acta*, **79**, 339–353 (2006).
25. N. V. Yashin, E. V. Averina, Yu. K. Grishin, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Reduction of 1-nitrospiro[2.2]pentanecarboxylates: convenient synthesis of novel polyspirocyclic cyclopropane amino acids, *Synthesis*, 279–284 (2006).
26. N. S. Zefirov, V. A. Palyulin, Quantitative description of ring shape and its application in conformational analysis. IV Национальная кристалло-химическая конференция, в кн.: *Сборник тезисов*, Черноголовка, Россия, 2006, II-9.
27. И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Многослойные перцептроны в исследовании зависимостей "структура–активность" для органических соединений, *Рос. хим. журн.*, **100**, 86–96 (2007).
28. R. L. Antipin, E. K. Beloglazkina, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, Arylselenation of conjugated dienes by arylselenamides in the presence of phosphorous(V) oxyhalides, *Tetrahedron Lett.*, **48**, 729–731 (2007).

29. Т. Ю. Баранова, О. Н. Зефирова, Н. В. Аверина, В. В. Боярских, Г. С. Борисова, Н. В. Зык, Н. С. Зефирова, Синтетические подходы к созданию производных индола, конденсированных с бицикло[3.3.1]нонановым каркасом, *ЖОрХ*, **43**, 1201–1206 (2007).
30. А. Э. Воронков, И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова, Построение молекулярной модели комплекса белка  $\chi$ Wnt8 с CRD-доменом mFZD8-рецептора, *ДАН*, **412**, 262–265 (2007).
31. Р. А. Газзаева, М. И. Хасанов, С. С. Мочалов, Н. С. Зефирова, 4Н-3,1-Бензоксазины из *o*-аминоацилбензолов, *ХГС*, 941–954 (2007); *Chem. Heterocycl. Comp.*, **43**, 799–810 (2007).
32. Н. И. Жохова, В. А. Палюлин, И. И. Баскин, А. Н. Зефирова, Н. С. Зефирова, Фрагментные дескрипторы в методе QSPR: применение для расчёта энтальпии испарения органических соединений, *Журн. физ. химии*, **81**, 1–4 (2007).
33. Н. И. Жохова, В. А. Палюлин, И. И. Баскин, А. Н. Зефирова, Н. С. Зефирова, Фрагментные дескрипторы с "выделенными" атомами и их применение в исследованиях количественных соотношений "структура–активность"/"структура–свойство", *ДАН*, **417**, 1–3 (2007).
34. О. Н. Зефирова, А. Г. Дийков, Н. В. Зык, Н. С. Зефирова, Лиганды колхицинового сайта тубулина: фармакофорная модель и новые структурные классы, *Изв. АН, Сер. хим.*, 655–662 (2007).
35. А. А. Иванова, И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова, Оценка значений констант ионизации для различных классов органических соединений с использованием фрагментного подхода к поиску зависимостей структура–свойство, *ДАН*, **413**, 766–770 (2007).
36. А. А. Кравцов, П. В. Карпов, И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова, "Бимолекулярный" QSAR: оценка свободной энергии сольватации органических молекул в различных растворителях, *ДАН*, **414**, 339–342 (2007).
37. R. Gleiter, D. B. Werz, F. Rominger, E. V. Zhutov, N. S. Zefirov, M. V. Proskurnina, Insight into the molecular structure and reactivity of  $\alpha,\omega$ -dialkoxy-substituted ethyne and butadiyne, *Eur. J. Org. Chem.*, 5834–5839 (2007).
38. А. А. Иванов, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова, Computer aided comparative analysis of the binding modes of the adenosine receptor agonists for all known subtypes of adenosine receptors, *J. Mol. Graphics Modell.*, **25**, 740–754 (2007).
39. О. А. Иванова, Е. М. Будынина, Е. В. Аверина, Т. С. Кузнецова, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова, [3+2] Cycloaddition of diazocarbonyl compounds to 1,1-dinitroethenes: Synthesis of functionalized *gem*-dinitrocyclopropanes, *Synthesis*, 2009–2013 (2007).
40. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, М. В. Присяжной, И. Н. Русецкая, Н. С. Зефирова, Трёхкомпонентный каталитический метод синтеза  $\alpha$ -аминофосфонатов с использованием  $\alpha$ -аминокислот в качестве аминной компоненты, *Изв. АН, Сер. хим.*, 768–774 (2007).
41. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, Ю. К. Гришин, А. С. Павлова, Н. С. Зефирова, Фосфониево-иодониевые илиды в реакциях нуклеофильного замещения, *ЖОрХ*, **43**, 209–214 (2007).
42. Д. И. Осолодкин, В. И. Чупахин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова, Моделирование и анализ лиганд-рецепторных взаимодействий для ГАМК С-рецептора, *ДАН*, **412**, 404–407 (2007).

43. В. А. Палюлин, Е. В. Радченко, И. И. Баскин, Н. С. Зефи́ров, Прогнозирование селективности лекарственных веществ, в кн.: *XIV Российский национальный конгресс "Человек и лекарство", 16–20 апреля, Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2007, с. 309.
44. A. A. Melnikov, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Generation of molecular graphs for QSAR studies: An approach based on supergraphs, *J. Chem. Inf. Modell.*, **47**, 2077–2088 (2007).
45. А. Ю. Толбин, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефи́ров, Несимметрично замещённые фталоцианины синтез и модифицированные структуры, *Успехи химии*, **76**, 732–745 (2007).
46. O. N. Zefirova, K. A. Potekhin, A. I. Touchin, N. V. Averina, T. Yu. Baranova, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, Molecular and crystal structure of indole derivatives fused with substituted bicyclo[3.3.1]nonane, *Struct. Chem.*, **18**, 457–460 (2007).
47. O. N. Zefirova, L. A. Zasurskaya, E. V. Nurieva, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, Molecular and crystal structure of ethylene acetal of *endo-endo*-3-trityloxymethylbicyclo[3.3.1]nonane-2-on-7-ol, *Struct. Chem.*, **18**, 461–464 (2007).
48. O. N. Zefirova, E. V. Nurieva, V. N. Nuriev, K. A. Potekhin, A. V. Maleev, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, Crystal structure of the tritilated product of 3-hydroxymethylbicyclo[3.3.1]nonan-2-on-7-ol ethylene acetal cyclization, *Mendeleev Commun.*, **17**, 332–334 (2007).
49. А. В. Чемагин, Н. В. Яшин, Е. Б. Аверина, Т. С. Кузнецова, Н. С. Зефи́ров, Новый метод получения 1-аминоспиро[2.2]пентан-1,4-дикарбоновой кислоты, *ДАН*, **419**, 772–774 (2008).
50. С. О. Бачурин, В. В. Григорьев, Н. С. Зефи́ров, М. И. Лавров, В. Л. Лаптева, В. А. Палюлин, N,N'-Замещённые 3,7-диазабицикло[3.3.1]нонаны, обладающие фармакологической активностью, фармацевтические композиции на их основе и способ их применения, Пат. России № 02333211 (2008).
51. С. О. Бачурин, С. И. Гаврилова, В. В. Григорьев, Б. К. Безноско, Н. С. Зефи́ров, Средство для улучшения когнитивных функций и памяти на основе гидрированных пиридо (4,3-*b*) индолов (варианты), фармакологическое средство на его основе и способ его применения, Пат. России № 02334514 (2008).
52. О. Б. Бондаренко, А. Ю. Гаврилова, Л. Г. Сагинова, Н. В. Зык, Н. С. Зефи́ров, Новые аспекты нитрозирования арилциклопропанов: нитрозирование фенилциклопропанов с объёмными алкильными заместителями в малом цикле, *ХГС*, 1566–1575 (2008); *Chem. Heterocycl. Comp.*, **44**, 1275–1283 (2008).
53. Е. Б. Аверина, О. А. Иванова, Е. М. Будынина, Ю. А. Волкова, Т. С. Кузнецова, Н. С. Зефи́ров, Ациклические нитроновые эфиры: получение и использование в синтезе N- и O-содержащих гетероциклов, *Вестн. МГУ, сер. Химия*, **49**, 163–182 (2008).
54. Ю. А. Волкова, О. А. Иванова, Е. Б. Аверина, Е. М. Будынина, Т. С. Кузнецова, Н. С. Зефи́ров, Изучение реакции тринитрометана с оксиранами, *ДАН*, **419**, 500–503 (2008).
55. Т. В. Дубинина, Р. А. Писковой, А. О. Толбин, В. Е. Пушкарев, М. Ю. Вагин, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефи́ров, Синтез и спектрально-электрохимические характеристики новых нафталоцианиновых комплексов лантанидов на основе 6,7-бис(фенокси)-2,3-нафталодинитрила, *Изв. АН, Сер. хим.*, 1879–1885 (2008).

56. О. Н. Зефирова, Е. В. Нуриева, В. Н. Нуриев, А. А. Иванов, Н. В. Зык, Н. С. Зефилов, Синтетические подходы к созданию физиологически активных полициклических соединений. VII. Синтез 3-гидрокси-7-(3,4-дигидроксиизо-бутил)бицикло[3.3.1]нонана, *ЖОрХ*, **44**, 1149–1152 (2008).
57. Н. В. Зык, А. Ю. Гаврилова, О. А. Мухина, О. Б. Бондаренко, Н. С. Зефилов, Новый метод активации этилфенилсульфената в реакциях электрофильного присоединения, *Изв. АН, Сер. хим.*, 2521–2527 (2008).
58. Е. В. Радченко, Г. В. Махаева, В. В. Малыгин, В. Б. Соколов, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Моделирование связи структуры О-фосфорилированных оксимов с их антихолинэстеразной активностью и селективностью с помощью метода анализа топологии молекулярного поля (МФТА), *ДАН*, **418**, 837–841 (2008).
59. А. В. Иванов, М. Ю. Центелович, Е. Г. Коган, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефилов, Хлорирование ароматических субстратов при катализе фталоцианиновыми комплексами, *Изв. АН, Сер. хим.*, 1644–1647 (2008).
60. А. В. Иванов, К. В. Кабанова, М. О. Бреусова, И. В. Жуков, Л. Г. Томилова, Н. С. Зефилов, Новые фосфорсодержащие фталоцианиновые комплексы металлов. Синтез, спектральные и электрохимические исследования, *Изв. АН, Сер. хим.*, 1634–1638 (2008).
61. С. Г. Клочков, В. С. Афанасьева, Н. С. Зефилов, Изучение сесквитерпеновых лактонов растений рода *Inula* как основы для разработки новых антинеопластов с проапоптотическим действием, *Технологии живых систем*, 2008, **5**, с. 31–39.
62. Е. П. Кондратович, И. И. Баскин, Н. И. Жохова, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Применение метода опорных векторов для прогнозирования принадлежности органических соединений к фармакологическим группам. в кн.: *XV Рос-сийский национальный конгресс "Человек и лекарство"*, 14–18 апреля, *Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2008, с. 382.
63. А. А. Мандругин, С. Я. Проскураков, Т. Т. Трофимова, Ю. Г. Верховский, Н. С. Зефилов, О. Н. Зефирова, В. М. Федосеев, Антигипотензивное средство, Пат. России, № 02338538 (2008).
64. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, А. С. Павлова, А. В. Миронов, Н. С. Зефилов, Иницированное псевдо-[3+2]-циклоприсоединение смешанных фосфониево-иодониевых илидов к ацетонитрилу, *Изв. АН, Сер. хим.*, 2195–2197 (2008).
65. E. D. Matveeva, N. S. Zefirov, Catalytic Kabachnik–Fields reaction: New horizons for old reaction, *ARKIVOC*, 1–17 (2008).
66. E. R. Milaeva, O. A. Gerasimova, Z. Jinqwei, D. V. Spakovsky, S. A. Syrбу, A. S. Semeykin, O. I. Koifman, E. G. Kireeva, E. F. Shevtsova, S. O. Bachurin, N. S. Zefirov, Synthesis and antioxidative activity of metalloporphyrins bearing 2,6-di-*tert*-butylphenol pendants, *J. Inorg. Biochem.*, **102**, 1348–1358 (2008).
67. С. С. Трач, Н. С. Зефилов, Перечисление замещённых производных с заданной группой симметрии: простое решение сложной проблемы, *Изв. АН, Сер. хим.*, 227–245 (2008).
68. А. Н. Федотов, Е. В. Трофимова, К. А. Потехин, С. С. Мочалов, Ю. С. Шабаров, Н. С. Зефилов, Синтез 2-амино-4Н-3,1-бензоксазинов и 2-амино-4Н-3,1-бензотиазинов перегруппировкой *o*-циклопропилфенилзамещённых мочевины и тиомочевины, *ХТС*, 115–126 (2008); *Chem. Heterocycl. Comp.*, **44**, 96–105 (2008).



69. Д. А. Шульга, А. А. Олиференко, С. А. Писарев, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Параметризация эмпирических схем расчёта частичных атомных зарядов для воспроизведения молекулярного электростатического потенциала, *ДАН*, **419**, 214–218 (2008).
70. E. V. Radchenko, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Molecular field topology analysis in drug design and virtual screening. Chapter 5. *The Royal Soc. Chem. Publishing*, 150–181 (2008).
71. D. Shulga, A. A. Oliferenko, S. A. Pisarev, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Fast tool for calculation of atomic charges well suited for drug design, *SAR and QSAR Environ. Res.*, **19**, 153–165 (2008).
72. Y. A. Volkova, O. A. Ivanova, E. M. Budynina, E. B. Averina, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, A new three-component one-pot reaction of trinitromethane, epoxides and alkenes *via* dinitronitronates: synthesis of highly functionalized 3,3-dinitroisoxazolidines, *Tetrahedron*, **64**, 3548–3553 (2008).
73. Y. A. Volkova, O. A. Ivanova, E. M. Budynina, E. B. Averina, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Tetranitromethane as an efficient reagent for the conversion of epoxides into  $\beta$ -hydroxy nitrates, *Tetrahedron Lett.*, **49**, 3935–3938 (2008).
74. A. E. Voronkov, I. I. Baskin, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Molecular modeling of modified peptides, potent inhibitors of the xWNT8 and hWNT8 proteins, *J. Mol. Graphics Modell.*, **26**, 1179–1187 (2008).
75. A. E. Voronkov, I. I. Baskin, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Molecular modeling of modified peptides, potent inhibitors of the xWNT8 and hWNT8 proteins (Errata), *J. Mol. Graphics Modell.*, **27**, 568–569 (2008).
76. O. Yakovenko, A. A. Oliferenko, V. G. Bdzhola, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Kirchhoff atomic charges fitted to multipole moments: Implementation for a virtual screening system, *J. Comput. Chem.*, **29**, 1332–1343 (2008).
77. O. N. Zefirova, E. V. Nurieva, H. Lemcke, A. A. Ivanov, D. V. Shishov, D. G. Weiss, S. A. Kuznetsov, N. S. Zefirov, Design, synthesis, and bioactivity of putative tubulin ligands with adamantane core, *Biorg. Med. Chem. Lett.*, **18**, 5091–5094 (2008).
78. O. N. Zefirova, E. V. Nurieva, H. Lemcke, A. A. Ivanov, N. V. Zyk, D. G. Weiss, S. A. Kuznetsov, N. S. Zefirov, Design, synthesis, and bioactivity of simplified taxol analogues on the basis of bicyclo[3.3.1]nonane derivatives, *Mendeleev Commun.*, **18**, 183–185 (2008).
79. E. B. Averina, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Polynitromethanes – unique reagents in the synthesis of nitro-substituted heterocycles, *Synlett*, 1543–1557 (2009).
80. E. B. Averina, K. N. Sedenkova, I. S. Borisov, Yu. K. Grishin, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Unusual methylation reaction of *gem*-bromofluorospirpentanes with methylolithium, *Tetrahedron*, **65**, 5693–5701 (2009).
81. И. И. Баскин, Н. И. Жохова, В. А. Палюлин, А. Н. Зефилов, Н. С. Зефилов, Многоуровневый подход к предсказанию свойств органических соединений в рамках QSAR/QSPR методологии, *ДАН*, **427**, 335–339 (2009).
82. И. С. Веселов, И. В. Трушков, Н. С. Зефилов, Г. В. Гришина, *транс*-4-Амино-3-гидроксипиперидины. Регио- и стереоспецифичный синтез, *ЖОрХ*, **45**, 1062–1072 (2009).

83. Т. Н. Грибанова, Н. С. Зефилов, В. И. Минкин, Квантово-химическое изучение гетероаналогов [8]циркуленов и их производных, *ДАН*, **426**, 105–110 (2009).
84. Н. И. Жохова, И. И. Баскин, Д. К. Бахронов, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Метод непрерывных молекулярных полей в поиске количественных соотношений структура–активность, *ДАН*, **429**, 201–205 (2009).
85. T. Yu. Baranova, N. V. Averina, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, K. A. Lyssenko, M. Yu. Antipin, O. N. Zefirova, Synthesis of indole derivatives fused with bicyclo[3.2.1]-octane framework, *Mendeleev Commun.*, **19**, 10–11 (2009).
86. И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Молекулярное моделирование рецепторов физиологически активных веществ для целей медицинской химии, *Успехи химии*, **78**, 539–557 (2009).
87. E. K. Beloglazkina, A. G. Majouga, A. A. Moiseeva, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, Oxidation of triphenylphosphine and norbornene by nitrous oxide in the presence  $\text{Co}^{\text{II}}\text{LCl}_2$  [L=3-phenyl-5-(2-pyridylmethylidene)-2-thiohydantoin]: the first example of  $\text{Co}^{\text{II}}$ -catalysed alkene oxidation by  $\text{N}_2\text{O}$ , *Mendeleev Commun.*, **19**, 69–71 (2009).
88. O. B. Bondarenko, A. Yu. Gavrilova, V. V. Polunina, Z. A. Starikova, N. V. Zyk, N. S. Zefirov, Unexpected mode of reactivity in nitrosation of *cis*-1,1-dichloro-2,3-diphenylcyclopropane with  $\text{NOCl}\cdot 2\text{SO}_3$ , *Mendeleev Commun.*, **19**, 12–13 (2009).
89. Е. В. Радченко, Г. В. Махаева, В. В. Малыгин, В. Б. Соколов, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Исследование структурных детерминант острой и отставленной нейротоксичности в ряду О-фосфорилированных оксимов с помощью метода анализа топологии молекулярного поля (MFTA), *ДАН*, **429**, 1–6 (2009).
90. А. З. Каджаева, Е. В. Трофимова, А. Н. Федотов, К. А. Потехин, Р. А. Газзаева, С. С. Мочалов, Н. С. Зефилов, Эфиры 2-арилциклопропанкарбоновых кислот в реакции с азотистой кислотой. Синтез арилзамещённых 3-этоксикарбонил-4,5-дигидроизксазолов и 3-этоксикарбонилизоксазолов, *ХГС*, 753–765 (2009); *Chem. Heterocycl. Comp.*, **45**, 595–605 (2009).
91. Е. П. Кондратович, Н. И. Жохова, И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Фрагментные дескрипторы при исследовании соотношений структура–активность: применение для прогнозирования принадлежности органических соединений к фармакологическим группам с использованием метода опорных векторов, *Изв. АН, Сер. хим.*, 641–647 (2009).
92. М. И. Лавров, В. А. Палюлин, В. В. Григорьев, С. О. Бачурин, Н. С. Зефилов, Дизайн новых модуляторов АМРА-рецепторов, влияющих на процессы формирования памяти, в кн.: *XVI Российский национальный конгресс "Человек и лекарство", 6–10 апреля 2009, Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2009, с. 543–544.
93. С. С. Мочалов, М. И. Хасанов, Н. С. Зефилов, О синтезе циклопропилзамещённых 4Н-3,1-бензоксазинов из 2-аминофенилциклопропилкетон и 2-циклопропаноиламиноацилбензолов, *ХГС*, 252–268 (2009); *Chem. Heterocycl. Comp.*, **45**, 201–214 (2009).
94. Д. И. Осолодкин, Д. А. Шульга, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Исследование взаимодействия манзамина А с киназой глюкогенсинтазы 3, в кн.: *XVI Российский национальный конгресс "Человек и лекарство", 6–10 апреля 2009, Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2009, с. 553.
95. E. D. Matveeva, T. A. Podrugina, A. S. Pavlova, A. V. Mironov, R. Gleiter,

- N. S. Zefirov, Novel photochemical reactions of phosphonium-iodonium ylides: synthesis of phosphonium-substituted oxazoles, *Eur. J. Org. Chem.*, 2323–2327 (2009).
96. E. D. Matveeva, T. A. Podrugina, A. S. Pavlova, A. V. Mironov, A. A. Borisenko, R. Gleiter, N. S. Zefirov, Heterocycles from phosphonium–iodonium ylides. Photochemical synthesis of  $\lambda^5$ -phosphinolines, *J. Org. Chem.*, **74**, 9428–9432 (2009).
97. P. V. Oliferenko, A. A. Oliferenko, G. Poda, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, A. R. Katritzky, New development in hydrogen bonding acidity and basicity of small organic molecules for prediction of physical and ADMET properties. Pt. 2. The universal solvation equation, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **49**, 634–646 (2009).
98. D. I. Osolodkin, V. I. Chupakhin, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Molecular modeling of ligand-receptor interaction in GABA<sub>C</sub> receptors, *J. Mol. Graphics Modell.*, **27**, 813–821 (2009).
99. Е. В. Трофимова, Б. П. Арчegov, А. Н. Федотов, Р. А. Газзаева, С. С. Мочалов, Н. С. Зефиров, 4Н-3,1-Бензоксазины из бензилциклопропанов. Первый пример кислотно-катализируемой перегруппировки в ряду *орто*-замещённых бензилциклопропанов, *ХТС*, 1368–1379 (2009); *Chem. Heterocycl. Comp.*, **45**, 1095–1104 (2009).
100. В. Ш. Фельдблюм, Т. Н. Антонова, Н. С. Зефиров, Циклизация и дегидроциклизация C(5)-углеводородов на наноплатиновых катализаторах и в присутствии сероводорода, *ДАН*, **424**, 489–492 (2009).
101. M. I. Skvortsova, V. A. Palyulin, N. S. Zefirov, Design of topological indices: computer-oriented approach, *SAR and QSAR Environ. Res.*, **20**, 357–377 (2009).
102. A. Yu. Tolbin, V. E. Pushkarev, L. G. Tomilova, N. S. Zefirov, Selective synthesis of clamshell-type binuclear phtalocyanines, *Mendeleev Commun.*, **19**, 78–80 (2009).
103. A. Yu. Tolbin, V. E. Pushkarev, L. G. Tomilova, N. S. Zefirov, New approach to the synthesis of planar binuclear phtalocyanines of Mg, Zn and rare earth elements, *Macroheterocycles*, **4**, 267–270 (2009).
104. S. S. Tratch, M. S. Molchanova, N. S. Zefirov, A unified approach to characterization of molecular composition, connectivity, and cofiguration: symmetry, chirality, and general problems for the corresponding combinatorial objects, *MATCH*, **61**, 217–266 (2009).
105. F. M. Bickelhaupt, C. F. Guerra, N. S. Zefirov, C(CN)<sub>5</sub>: transition state or intermediate, *Mendeleev Commun.*, 72–73 (2010).
106. Н. И. Жохова, И. И. Баскин, А. Н. Зефиров, В. А. Палюлин, Н. С. Зефиров, Псевдофрагментные дескрипторы на основе комбинаций свойств атомов в исследованиях количественных соотношений структура–свойство при прогнозировании физических свойств полимеров, *ДАН*, **430**, 635–638 (2010).
107. A. V. Chemagin, N. V. Yashin, Yu. K. Grishin, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Diethyl[nitro{diazo}methyl]phosphonate: synthesis a reactivity roward alkenes, *Synthesis*, 259–266 (2010).
108. N. D. Chuvytkin, E. A. Smolenskii, M. S. Molchanova, N. S. Zefirov, Geometrical properties of nodal surfaces of many-electron wave functions, *Int. J. Quantum. Chem.*, **109**, 1809–1819 (2010).

109. Н. В. Захаревич, Д. И. Осолодкин, И. И. Артамонова, В. А. Палюлин, В. Н. Даниленко, Н. С. Зефилов, Классификация бактериальных серинтреониновых протеинкиназ эукариотического типа – биоминерной для создания новых лекарств, в кн.: *XVII Российский национальный конгресс "Человек и лекарство", 12–16 апреля, Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2010, с. 618.
110. T. V. Dubinina, A. V. Ivanov, N. E. Borisova, S. A. Trashin, S. I. Gurskiy, L. G. Tomilova, N. S. Zefirov, Synthesis and investigation of spectral and electrochemical properties of alkyl-substituted planar binuclear phthalocyanine complexes sharing a common naphthalene ring, *Inorg. Chim. Acta*, **363**, 69–71 (2010).
111. T. N. Gribanova, N. S. Zefirov, V. I. Minkin, Structure and stability of the heteroannulated [8–10]ciculenes: a quantum-chemical study, *Pure Appl. Chem.*, **82**, 1011–1024 (2010).
112. Е. Д. Матвеева, Р. Глейгер, Н. С. Зефилов, Новая фотохимическая реакция смешанного фосфониевого-иодониевого илида с фенилацетиленом как метод синтеза дифенил-1 $\lambda^5$ -фосфинолина, *Изв. АН, Сер. хим.*, 478 (2010).
113. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, И. Н. Колесникова, Н. С. Зефилов, Гидрофосфорилирование гидразонов и азинов, катализируемое фталоцианинами, *Изв. АН, Сер. хим.*, 571–576 (2010).
114. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, И. Н. Колесникова, Н. С. Зефилов, Бензоилзамещённые гидразоны в реакции каталитического гидрофосфорилирования, *Изв. АН, Сер. хим.*, 403–408 (2010).
115. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, М. В. Присяжной, С. О. Бачурин, Н. С. Зефилов, Синтез "трипептида памяти" (Arg-Glu-Arg, RER) и реакция Кабачника–Филлдса с ди- и трипептидами как метод синтеза фосфорсодержащих производных пептидов, *Изв. АН, Сер. хим.*, 196–204 (2010).
116. Е. Д. Матвеева, Т. А. Подругина, И. Н. Колесникова, М. В. Присяжной, Г. Г. Каратеев, Н. С. Зефилов, Каталитическое гидрофосфорилирование алкил- и ацилгидразонов, *Изв. АН, Сер. хим.*, 409–415 (2010).
117. Н. И. Кондратович, Н. И. Жохова, И. И. Баскин, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Фрагментные дескрипторы в QSAR: предсказание принадлежности органических соединений к фармакофорной группе с использованием SVM подхода, *Изв. АН, Сер. хим.*, 641–648 (2010).
118. Д. А. Царева, Д. И. Осолодкин, Д. А. Шульга, А. А. Олиференко, В. А. Палюлин, Н. С. Зефилов, Применимость различных схем расчёта атомных зарядов в моделировании 3D QSAR, в кн.: *XVII Российский национальный конгресс "Человек и лекарство", 12–16 апреля, Сборник материалов конгресса (тезисы докладов)*, Москва, 2010, с. 740.
119. A. Yu. Tolbin, V. E. Pushkarev, L. G. Tomilova, N. S. Zefirov, New approach to the synthesis of planar binuclear phthalocyanines of Mg, Zn and rare earth elements, *Macroheterocycles*, **3**, 30–32 (2010).
120. Y. A. Volkova, E. B. Averina, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov, Ring opening of aziridines with tetranitromethane in the presence of triethylamine. Efficient synthesis of  $\beta$ -tosylaminonitrates, *Tetrahedron Lett.*, **51**, 2254–2257 (2010).