

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук **Загрибельного Богдана** на тему: «**Платформа генеративной химии в моделировании структур потенциальных лекарственных веществ**»

по специальностям 1.4.16. Медицинская химия, 1.4.3. Органическая химия.

Развитие технологий автоматизированного рационального дизайна малых лекарственных молекул представляет особый интерес для медицинских химиков и фармацевтической отрасли. Обозреваемая в автореферате диссертационная работа посвящена платформе генеративной химии, призванной поддержать развитие таких технологий на новом уровне.

В работе в соответствии с поставленной целью были разработаны алгоритм оценки синтезируемости структур потенциальных лекарственных веществ и соответствия их структурным трендам современной медицинской химии. Так, разработанная функция MCE-18 эффективно описывает эволюцию химического пространства малых лекарственных молекул, в отличие от известного ранее дескриптора F_{sp}^3 .

Стоит отметить, что валидационная часть работы, связанная с изучением разработанных при помощи платформы веществ с противовирусной активностью в отношении SARS-CoV-2, содержит ценную информацию о зависимости структура-активность, структура-свойство для нового хемотипа ковалентных ингибиторов главной протеазы SARS-CoV-2.

Достоверность приведенных результатов и их интерпретация не вызывает сомнений, поскольку в работе широко использован комплекс современных химических, в частности, хемоинформатических, физико-химических, биологических, в том числе структурно-биологических, методов исследования. Ковалентное связывание соединения-хита с главной протеазой коронавируса подтверждено кристаллографическим методом, что представляет особую научную ценность.

Результаты исследования отражены в 6 статьях в международных рецензируемых научных изданиях, индексируемых международными базами данных Web of Science и Scopus и рекомендованных диссертационным советом МГУ для публикации результатов диссертационных работ и 3 патентах.

Замечаний по автореферату нет.

Представленные в автореферате материалы позволяют сделать вывод о том, что диссертация Загрибельного Богдана «Платформа генеративной химии в моделировании структур потенциальных лекарственных веществ» отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам

подобного типа. Содержание диссертации соответствует специальностям 1.4.16. Медицинская химия, 1.4.3. Органическая химия (по химическим наукам), а также критериям, определенным п.2. Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова.

Автор диссертационной работы Загрибельный Богдан заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.16. Медицинская химия, 1.4.3. Органическая химия.

Заведующий лабораторией информационных технологий в фармакологии и компьютерного моделирования лекарств Научного центра инновационных лекарственных средств с опытно-промышленным производством Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, доктор биологических наук, старший научный сотрудник ВАК, профессор кафедры фармакологии и биоинформатики ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России

Подпись

Васильев Павел Михайлович

Почтовый адрес: 400131, г. Волгоград, ул. Павших борцов, д. 1.

Рабочий телефон: +7(8442) 40-30-04; Рабочий e-mail: @mail.ru

13 ноября 2025 г.

Подпись тов. Васильева П.М.
УДОСТОВЕРЯЮ
Инспектор по кадрам
Подпись, _____ печать
Волгоградский государственный
Медицинский университет