

## 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.

Химическое разнообразие потенциальных лекарственных средств не позволяет исследовать его обычными методами и вычислительные подходы начинают играть решающую роль в поиске активных соединений. Главный практический результат работы – это платформа, которая представляет собой комплексный конвейер, способный генерировать новые молекулярные структуры с помощью ансамбля ML-моделей, оценивать и фильтровать их с помощью множества модулей и оптимизировать процесс за счет цикла обратной связи, где оценка всех модулей объединяется в "функцию награды" для обучения генеративных моделей.

Основным результатом является не просто теоретическое исследование, а создание полнофункционального, практически применимого и экспериментально подтвержденного инструмента (Chemistry42 и его ключевых компонентов ReRSA и MCE-18) для ускорения и оптимизации процесса открытия новых лекарств. Эта работа переводит генеративную химию из области академических исследований в сферу промышленного применения.

Достоверность данных, представленных в автореферате диссертации Богдана Загрибельного, обосновывается следующими ключевыми аспектами. В работе применялись широко используемые в научной практике алгоритмы и программное обеспечение (например, хемоинформационная библиотека RDKit на Python). Разработанные методы (ReRSA, MCE-18) и платформа Chemistry42 прошли многократную экспериментальную проверку. Результаты работы опубликованы в авторитетных международных журналах с высоким импакт-фактором. Ключевые разработки (например, метод ReRSA) защищены патентами. Автор непосредственно участвовал в создании и валидации ключевых элементов платформы. Таким образом, достоверность данных обеспечивается комплексным подходом, включающим теоретическое обоснование, экспериментальную проверку, международное признание и практическое применение.

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. В качестве комментария можно сказать об упоминании апо-форм белков без прояснения способа их использования.

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.

Заместитель декана Факультета Биоинженери и Биоинформатики МГУ им. М.В. Ломоносова, профессор кафедры, д.х.н.

*Подпись, печать*

Андрей Викторович Головин

12.11.2025

119234, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы МГУ 1, стр. 73, Факультет биоинженерии и биоинформатики

Тел.: +7 (495) 939-53-05; E-mail: [golovin@belozersky.msu.ru](mailto:golovin@belozersky.msu.ru)