

Отзыв научного руководителя

на диссертационную работу Фоминой Анастасии Дмитриевны
«Систематический ансамблевый докинг потенциальных лигандов главной протеазы
SARS-CoV-2 и белка NS1 флавивирусов»,
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.16. Медицинская химия

Фомина А.Д. окончила Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова в 2019 году, и в том же году поступила в аспирантуру на кафедру Медицинской химии и тонкого органического синтеза Химического факультета МГУ, где совместно с лабораторией противовирусных лекарственных средств ФГАНУ “ФНЦИРИП им. М.П. Чумакова РАН” (Институт полиомиелита) проводила исследования в области структурно-обоснованного виртуального скрининга.

Научная работа Фоминой А.Д. посвящена разработке методов поиска противовирусных препаратов на основе анализа больших объёмов химико-биологических данных. Разработка систематических и интегрированных подходов к поиску противовирусных препаратов является актуальной задачей, поскольку в настоящее время отсутствуют специфические лекарственные средства для терапии многих социально значимых вирусных инфекций и существует постоянная угроза возникновения новых вирусных заболеваний с пандемическим потенциалом.

За время работы А. Д. Фомина выполнила большой объём исследований в области разработки структурно-обоснованных методов прогнозирования противовирусной активности низкомолекулярных соединений. Ей был проведён квалифицированный анализ литературы в области методов ансамблевого докинга и разработки ингибиторов главной протеазы SARS-CoV-2 и противофлавивирусных препаратов, связывающихся с белком NS1. Разработанная ей методика систематического отбора ансамблей структур для молекулярного докинга позволяет автоматизировать выбор структур для проведения виртуального скрининга.

Работа Фоминой А.Д. содержит ряд новых интересных результатов, имеющих значение для развития структурно-обоснованного дизайна лекарственных средств. Их научная достоверность не вызывает сомнения. Результаты работы полно опубликованы в 3 научных рецензируемых периодических изданиях, а также докладывались на международных и Всероссийских конференциях. По результатам

работы получены свидетельства о государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ и баз данных.

Считаю, что диссертационная работа Фоминой Анастасии Дмитриевны «Систематический ансамблевый докинг потенциальных лигандов главной протеазы SARS-CoV-2 и белка NS1 флавивирусов» соответствует требованиям п. 2 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова» и может быть рекомендована для рассмотрения в диссертационном совете МГУ.014.7 по специальности 1.4.16. Медицинская химия (химические науки).

Научный руководитель:

ведущий научный сотрудник

кафедры медицинской химии и тонкого органического синтеза

Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова,

кандидат химических наук,

старший научный сотрудник *подпись* Палюлин Владимир Александрович

09.12.2024

Личную подпись *Палюлин В.А.*

ЗАВЕРЯЮ: *подпись*, печать

Нач. отдела делопроизводства

химического факультета МГУ

Самошина Д.Х.