

Отзыв научного руководителя

на диссертационную работу Загрибельного Богдана
«Платформа генеративной химии в моделировании структур потенциальных
лекарственных веществ»,
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальностям 1.4.3. Органическая химия и 1.4.16. Медицинская химия

Загрибельный Богдан, 1997 г.р., окончил химический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова в 2019 г. и в том же году поступил в аспирантуру на кафедру медицинской химии и тонкого органического синтеза химического факультета.

Научная работа Загрибельного Б. посвящена генеративной химии – области научного знания, находящейся на пересечении двух актуальных направлений: моделирования структур потенциальных лекарственных средств и искусственного интеллекта. Генеративная химия, основная задача которой – автоматизированное создание молекулярных структур с заданными свойствами, как раз объединяет эти два направления в контексте фармацевтической разработки. В диссертации представлено как общее описание платформы генеративной химии, так и подробный разбор разработки отдельных модулей этой платформы, созданием которых занимался сам соискатель.

Выносимые на защиту положения имеют всестороннюю обоснованность и подтверждаются широким спектром экспериментальных данных. Безусловную новизну исследования определяет как тот факт, что разработанная платформа генеративной химии является первой в своём классе и в мировом масштабе, так и то, что сама диссертация представляет собой первое отечественное научное исследование, как по теме платформенных решений для решения задач генеративной химии, так и по теме моделирования синтетической доступности потенциальных лекарственных веществ в контексте генеративной химии.

Диссертационная работа Загрибельного Богдана является завершённым научно-квалификационным трудом, в котором решён ряд важнейших задач рационального дизайна малых лекарственных молекул, имеющих принципиальное значение для фармацевтических наук и медицинской химии.

В частности, в работе предложено решение одной из ключевых проблем автоматизированного конструирования молекулярных структур лекарственных соединений – задачи корректного моделирования их синтетической доступности. Соискатель не только разработал новую модель синтетической доступности ReRSA, но и впервые предложил теоретическую концепцию синтетической доступности на основе

вероятностного подхода. Помимо этого, соискателем был предложен новаторский подход по моделированию синтетической доступности, используя крупные, генерируемые автоматизированным способом библиотеки SMARTS-подструктур.

Также стоит отметить, что поскольку Chemistry42 стала первой платформой для автоматизированного моделирования молекулярных структур потенциальных лекарственных веществ, разработка демонстрационных модельных экспериментов для её тестирования и обучения пользователей явилась самостоятельной и значимой научной задачей. Наконец, с использованием данной платформы, в разработке которой Загрибельный Б. принимал непосредственное участие, им был реализован проект по ранней разработке нового ингибитора главной протеазы коронавируса SARS-CoV-2.

В ходе выполнения своей диссертационной работы Загрибельный Б. сформировался как плодотворный молодой исследователь, умеющий глубоко мыслить, находящий междисциплинарные паттерны и умело реализующий их, так и как молодой научный руководитель, способный самостоятельно формулировать темы актуальных научных исследований и вести руководство дипломной работой. Под руководством Загрибельного Б. была защищена дипломная работа студента химического факультета Бондарева Н.Е.

Диссертационная работа Загрибельного Богдана 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 по специальностям 1.4.16. Медицинская химия (химические науки) и 1.4.3. Органическая 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

02.09.2024

Личную подпись Палюлин В.А.

ЗАВЕРЯЮ: *подпись*,

печать

Зам. Нач. отдела делопроизводства
химического факультета МГУ

Паланская В.В.