

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Мартыновой Юлии Зайнитдиновны
«Связь «структура-свойство» в ряду некоторых азот-, кислород- и серосодержащих
ингибиторов окислительных процессов»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Мартыновой Ю.З. посвящена разработке путей теоретического предсказания новых структур в ряду некоторых азот-, кислород- и серосодержащих соединений с выраженными антиокислительными, противовоспалительными и противоопухолевыми свойствами. Это междисциплинарная актуальная область исследования, в которых методы теоретической физической химии и хемоинформатики используются для разработки теоретического аппарата медицинской химии и научных основ синтеза новых лекарств и фармпрепаратов. В работе в рамках компьютерной программы GUSAR2019 были решены задачи определения структурных параметров, определяющих наличие у соединений ингибиторной активности, а также конструирования новых молекул с высокой эффективностью противовоспалительного действия и сниженной токсичностью.

Существенным моментом новизны является построение валидных моделей QSAR/QSPR, ориентированных на количественный прогноз антиокислительной, противовоспалительной и противоопухолевой активности, на основе структурно разнородных органических соединений. С использованием данной методологии предложено 30 соединений-хитов, для 19 из которых предсказанные виды биологической активности были подтверждены экспериментально, в том числе и лично соискателем.

Таким образом, полученные Мартыновой Ю.З. результаты имеют высокую научную и практическую значимость не только для физической и органической химии, но биохимии и экспериментальной медицины в целом. Выявленные закономерности с строения антиоксидантов, а также ингибиторов циклооксигеназы-2 и 15-липоксигеназы могут быть использованы для оптимизации направленного конструирования, синтеза, поиска и создания новых биологически активных веществ с выраженными противовоспалительными, антиокислительными и противоопухолевыми свойствами.

Достоверность представленных результатов не вызывает сомнений, так как исследования выполнены на высоком методическом уровне с использованием достаточного количества адекватных поставленным задачам методов исследований, с применением необходимых методов статистической обработки полученных результатов.

По автореферату диссертации имеются замечания:

1. Учитывались ли в процессе моделирования антиоксидантов, кроме пероксильных радикалов 1,4-диоксана другие радикальные интермедиаты?
2. Из текста автореферата не ясно, в чем преимущества программы GUSAR 2019 по сравнению с другими аналогами? Какие задачи позволил решить соискателю выбор этой программы для QSAR/QSPR-моделирования?

Несмотря на замечания, общая оценка диссертационной работы положительна. Все основные результаты опубликованы в изданиях из перечня рекомендованных ВАК. Считаю, что работа соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия и критериям п. 9 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного

Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Автор, Мартынова Юлия Зайнитдиновна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Файзуллина Лилия Халитовна

«30» января 2024 г.

доктор химических наук (1.4.3. Органическая химия), ведущий научный сотрудник лаборатории фармакофорных циклических систем Уфимского института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН)

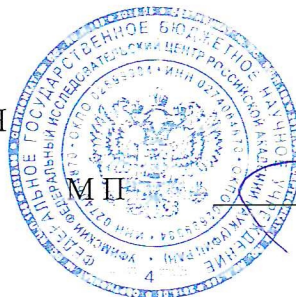
Я, Файзуллина Лилия Халитовна, согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.2.479.04 ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» и их дальнейшую обработку.

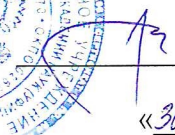
Подпись Файзуллиной Л.Х.

заверяю,

заместитель директора УФИХ УФИЦ РАН

канд. хим. наук



 / Р.А. Хуснутдинов

«30» января 2024

450054, г. Уфа, проспект Октября, д. 71, Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук, лаборатория химической физики

E-mail: lfajzullina@yandex.ru, тел.: +7 (960) 384-18-14.