

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **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

**Актуальность темы.** Проблема изучения взаимосвязи между строением, свойствами и биологической активностью разных классов органических соединений в настоящее время является одной из наиболее актуальных направлений в физической химии, биохимии и медицине. Это объясняется тем, что при создании новых лекарств в настоящее время широко используются математические методы прогнозирования, которые позволяют на досинтетической стадии проводить отсев низкоэффективных соединений, а также предсказывать избирательность действия соединений-хитов в отношении определенных ферментов и рецепторов. В этой связи диссертационная работа Мартыновой Ю.З., посвященная установлению количественной взаимосвязи «структура-свойство» в ряду азот-, кислород- и серосодержащих соединений в качестве перспективных биологически активных веществ, обладающих антиокислительными и противовоспалительными свойствами с помощью метода QSAR/QSPR-моделирования и молекулярного докинга, является актуальной. разработана методика виртуального скрининга для поиска антиоксидантов и селективных ингибиторов 15-липоксиогеназы (15-ЛОГ) и циклооксигеназы-2 (ЦОГ-2).

Соискателю удалось корректно решить все поставленные перед ним задачи с привлечением экспериментальных (манометрический метод по поглощению кислорода воздуха) и вычислительных методов (методы QSAR/QSPR-моделирования и молекулярного докинга). В результате построен комплекс статистически значимых консенсус моделей QSAR/QSPR, ориентированных на количественный прогноз антиокислительной, противовоспалительной, противоопухолевой активности. С использованием построенных моделей предложено 30 соединений-хитов, при этом для 14 из них эффект ингибирования циклооксигеназы-2 и 15-липоксиогеназы подтвержден результатами независимых биологических исследований в условиях *in vivo*. Для 5 антиоксидантов, также отобранных с использованием построенных Мартыновой Ю.З. QSPR-моделей, из локальных библиотек в Институте нефтехимии и катализа, антиокислительный эффект также был подтвержден экспериментальными исследованиями, выполненными с участием соискателя.

**Замечания.** Автореферат диссертации Мартыновой Ю.З. грамотно и понятно написан. В качестве замечаний можно отметить следующие. 1. Считаю, что статья под номером 11 в разделе «Основные публикации по теме диссертации» не соответствует поставленной цели. 2.

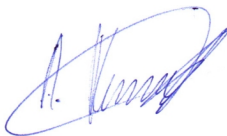
На мой взгляд, желательно соблюдение единообразия в присвоении шифров моделируемым соединениям, представленным на рисунках 3 и 4 в автореферате соответственно.

**Заключение.** Однако указанные замечания не влияют на общее положительное впечатление от работы, выполненной на высоком методическом уровне с использованием современных математических методов прогнозирования. Это обеспечило надежность полученных результатов. Работа хорошо апробирована (13 статей и 12 тезисов). Автореферат в полном объеме и правильно отражает содержание работы.

Считаю, что диссертация Мартыновой Ю.З. на тему «Связь «структура-свойство» в ряду некоторых азот-, кислород- и серосодержащих ингибиторов окислительных процессов» является полновесным, законченным исследованием и по новизне, научной и практической значимости, достоверности полученных результатов вполне соответствует требованиям пп. 9 – 14 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, а её автор – Мартынова Юлия Зайнитдиновна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

**Акбулатов Азат Фатхуллович**

«30» января 2024 г.



кандидат химических наук (02.00.04 – Физическая химия), науч. сотр. лаборатории функциональных материалов для электроники и медицины Отдела кинетики и катализа Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук (ФИЦ ПХ и МХ РАН)

Почтовый адрес: 142432, Московская обл., г. Черноголовка, проспект академика Семенова, д. 1  
E-mail: qweas89@mail.ru, тел.: +7 (496) 522-19-37

Я, Акбулатов Азат Фатхуллович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.2.479.04, и их дальнейшую обработку.

Подпись Акбулатова А.Ф.

заверяю,

ученый секретарь ФИЦ ПХ и МХ РАН

доктор хим. наук



/ Б.Л. Психа

«30» января 2024