

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мартыновой Юлии Зайнитдиновны «Связь «структура-свойство» в ряду некоторых «азот-кислород» и серосодержащих ингибиторов окислительных процессов», представленный на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Работа Мартыновой Юлии Зайнитдиновны посвящена изучению количественной взаимосвязи между структурой органического соединения и его физико-химическими свойствами. В качестве объектов исследования автор использовал азот-, кислород- и серосодержащие соединения, которые являются наиболее перспективными биологическими веществами, обладающие антиокислительными и противоопухолевыми свойствами. Для достижения цели Ю.З. Мартынова использовала методы QSAR/QSPR-моделирования и молекулярного докинга.

Об актуальности и своевременности проведения данных исследований свидетельствует поддержка работы грантом РНФ 19-73-20073, выполняемого в рамках Президентской программы исследовательских проектов, выполняемых как ведущими, так и молодыми учеными.

Тема исследования автором выбрана не случайно, так как проблема установления взаимосвязи «структура-свойство» была и остается важнейшей для понимания реакционной способности соединений и предсказания их активности в различных процессах. В ферментативных реакциях раскрытие подобных взаимосвязей представляется наиболее сложной и трудоемкой задачей.

На основании данных, имеющихся в литературе, автор формулирует цель и основные задачи работы, решение которых обеспечивают ее достижение. Следует подчеркнуть, что задачи, поставленные соискателем, успешно решены.

Объективность полученной автором информации, а также достоверность сделанных обобщений и выводов обеспечена выполнением исследований на высоком техническом уровне с использованием современных расчетных программ.

Теоретические обобщения и выводы, сделанные Ю.З. Мартыновой, не противоречат общепринятым фактам, имеют удовлетворительное соответствие расчетных и нативных положений тестовых лигандов с результатами работ других авторов, работающих в данной области научных интересов.

Автором работы проанализирован достаточный объем литературы – список оригинальных источников включает 119 наименований. Результаты выполненного эксперимента систематизированы в 37 таблицах и представлены в виде различных зависимостей на 37 рисунках. Текст работы включает 8 приложений. Общий объем работы изложен на 146 страницах текста.

К несомненным достижениям работы следует отнести следующие положения:

- автор для раскрытия связи «структура-свойство» в ряду некоторых «азот-кислород» и серосодержащих ингибиторов окислительных процессов провел моделирование биологической активности и виртуальный скрининг для 17 циклооксигеназ;

- предложены консенсус-модели, которые могут быть успешно использованы для отбора в базы данных новых потенциально эффективных 35 соединений-хитов - антиоксидантов, противовоспалительных и противоопухолевых препаратов;

- доказано, что алгоритмы, положенные в основу использованных моделей, статистически устойчивы и применимы для структурно разнообразных соединений;

- доказано, что теоретически рассчитанные значения констант удовлетворительно совпадают с определенными экспериментально для соединений тестовых выборок и антиоксидантов;

- избирательность некоторых биологически активных веществ, представителей циклооксигеназ, доказана независимыми биологическими испытаниями, проведенными в «Саратовском государственном университете им. Н.Г. Чернышевского» и в ряде зарубежных фармацевтических фирм, что доказывает достоверность полученных автором результатов и объективную предсказательную способность используемых в работе моделей;

- автором предложен новый комплексный подход к проведению моделирования взаимосвязи «структура-биологическое свойство» и поиска биологически активных веществ с выраженными окислительными, противовоспалительными и противоопухолевыми свойствами.

Работа прошла необходимую апробацию - автор имеет 25 публикаций, в том числе 10 статей в рецензируемых научных изданиях и международных реферативных базах, рекомендованных ВАК РФ, 3 статьи в журналах, в индексируемых базах Web of Science и Scopus. Результаты работы неоднократно были представлены на конференциях различного уровня.

Текст реферата аккуратно оформлен, написан логичным, грамотным языком. При чтении текста автореферата возникают замечания:

1. Значительно перегружена вступительная часть автореферата, объем которого явно превышает рекомендуемый для работ, защищаемых на соискание ученой степени кандидата наук.
2. В разделе «Заключение» целесообразно было бы более четко отразить направления, раскрывающие возможные перспективы дальнейшего развития работы.

Полученные результаты и их теоретическое обобщение отвечают паспорту специальности 1.4.4 – Физическая химия в п.9 в части «Связь

реакционной способности реагентов с их строением и условиями проведения реакции» и п.10 в части «Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства».

Можно заключить, что по актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, полноты публикаций диссертация «Связь «структура-свойство» в ряду некоторых «азот-кислород» и серо-содержащих ингибиторов окислительных процессов» отвечает критериям пп.9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор Мартынова Юлия Зайнитдиновна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Лефедова Ольга Валентиновна, доктор химических наук по специальностям: 02.00.03 – органическая химия и 02.00.04 – физическая химия
профессор, профессор кафедры физической и коллоидной химии
Ивановского государственного химико-технологического университета
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» (ФГБОУ ВО ИГХТУ)
153000 г. Иваново, пр. Шереметевский, д.7
Тел.+7(4932) 30-73-46
Эл. почта: physchem.606@yandex.ru

25.01.2024 г.  Лефедова Ольга Валентиновна

Подпись руки д.х.н, проф. Лефедовой Ольги Валентиновны удостоверяю

Ученый секретарь диссертационного совета Д24.2.302.01 Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» (ФГБОУ ВО ИГХТУ)



 Квиткова Елена. Юрьевна