

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 специальности 1.4.4. Физическая химия

В диссертации решена важная и актуальная для физической химии задача установления методами QSAR/QSPR (Quantitative Structure – Activity/Property Relationship) и молекулярного докинга количественной связи «структура – свойство» для ряда азот-, кислород- и серосодержащих соединений как перспективных биологически активных веществ, обладающих антиокислительными и противовоспалительными свойствами. Дополнительным подтверждением актуальности работы является финансовая поддержка исследования грантом РНФ.

Основная научная новизна исследования заключается в том, что впервые построен комплекс валидных статистически значимых моделей QSAR/QSPR на основе довольно существенно отличающихся по строению органических соединений. Это отличие заключается как в природе ароматического каркаса, так и связанных с ним функциональных групп. Все построенные модели продемонстрировали приемлемую предсказательную способность при количественной оценке параметра lgk_7 для антиоксидантов и параметра pIC_{50} для ингибиторов 15-липоксиогеназы и циклооксигеназы-2. Полученные модели можно использовать для виртуального скрининга химических баз данных с целью поиска в них новых соединений, аналогичных объектам исследования, с требуемыми антиокислительными и ингибиторными свойствами – это практическая значимость работы.

Результаты диссертации великолепно опубликованы: 13 статей в научных журналах и 12 тезисов докладов в сборниках материалов конференций.

По работе возникли следующие замечания и вопросы.

1. Автор не приводит аргументаций по использованию базы данных ChEMBL. Почему нельзя одновременно использовать данные из баз ChEMBL и PubChem?

2. Подписи на графиках и сами графики очень мелкие (например, на рис. 2а, 2б, 5а, 5б).

3. На рис. 5, содержащем экспериментальные данные по кинетике окисления, отсутствуют планки погрешностей. Возникает ощущение, что кинетические эксперименты проводились однократно.

4. Обозначения индивидуальных рисунков даны латинскими символами, хотя в русскоязычных текстах общеприняты кириллические обозначения.

5. На стр. 13 автореферата автор предполагает, что соединения-хиты, отобранные в процессе виртуального скрининга с использованием консенсус-моделей M132 и M135, могут обнаружить выраженную ингибиторную активность в отношении ЦОГ-2 и в условиях *in vivo*. Однако экспериментальная проверка данного утверждения отсутствует.

6. Диссертационное исследование выглядело бы методологически более целостным, если соискатель применил метод молекулярной динамики в дополнение к молекулярному докингу.

7. В научной новизне говорится о 19 соединениях, для которых подтверждены антиокислительные свойства и ингибиторный эффект в отношении 15-липоксигеназы и циклооксигеназы-2. Возникает закономерный вопрос, все ли эти соединения одновременно проявляют выраженные антиокислительный и противовоспалительный эффекты?

Высказанные замечания не являются принципиальными и не снижают общего положительного впечатления от работы.

Содержание автореферата позволяет заключить, что диссертация полностью соответствует всем требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842), а ее автор – Мартынова Юлия Зайнитдиновна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Доктор химических наук

(1.4.7.(02.00.06) Высокомолекулярные соединения),
профессор

(1.4.7.(02.00.06) Высокомолекулярные соединения),
заведующий кафедрой общей химической технологии
ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский
технологический университет»

Улитин Николай Викторович

Тел.: +7-927-034-10-89 (моб.), +7(843)231-41-62 (раб.),

e-mail: n.v.ulitin@mail.ru, n.v.ulitin@kstu.ru, UlitinNV@corp.knrtu.ru

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Кандидат химических наук

(2.6.11.(05.17.06) Технология и переработка
синтетических и природных полимеров
и композитов), доцент кафедры

общей химической технологии

ФГБОУ ВО «Казанский национальный

исследовательский технологический университет»

Лифанов Александр Дмитриевич

Тел.: +7-927-038-01-47 (моб.), +7(843)231-41-62 (раб.),

e-mail: lifanov84@mail.ru, LifanovAD@corp.knrtu.ru



Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Подписи Улитина Н.В., Лифанова А.Д. *заверено*
Учредителю секретарь ФГБОУ ВО «КНИТУ» *Улитин Н.В.*

420015, г. Казань, ул. К. Маркса, 68, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (ФГБОУ ВО «КНИТУ»),
тел.: +7 (843) 231-42-16, оф. сайт: <https://www.kstu.ru>, e-mail: office@kstu.ru