

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Столбова Леонида Алексеевича на тему “Разработка подходов к виртуальному скринингу антивирусных соединений с учетом гетерогенности информации”, представленной на соискание учёной степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. – “Математическая биология, биоинформатика”.

В данной диссертационной работе Л.А. Столбовым представлена разработка, а также результаты тестирования новых теоретических методов уровня QSAR для виртуального скрининга потенциальных лигандов белков. Разработанные методы тестировались на основе анализа зависимостей «структура-активность» в созданных в данной работе базах данных гетерогенных соединений, для которых такие зависимости заранее известны, так же и в базе данных токсичности соединений Tox21, которая широко используется для тестирования новых QSAR моделей. Кроме того, в работе с помощью разработанных методов получены количественные зависимости «структура-активность» для ингибиторов белков вирусов ВИЧ-1 и SARS-CoV-2, обладающие хорошей точностью и предсказательной способностью. На основе этих результатов создан практически полезный и свободно доступный веб-ресурс AntiHIV Pred, позволяющий оценивать фармакологические характеристики, связанные с анти-ВИЧ активностью и сопутствующими заболеваниями. Результаты этой работы хорошо опубликованы в 6 публикациях в отечественных и международных специализированных научных журналах.

Поскольку, кроме токсичности, все известные лекарственные средства так или иначе обладают и другим важным недостатком, а именно уровнем побочных эффектов. В связи с этим при чтении автореферата диссертации у меня возник вопрос - возможно ли учесть в разрабатываемых автором QSAR моделях также и фактор вероятного уровня побочных эффектов лекарство- подобных соединений?

Из недостатков можно отметить то, что некоторые выводы (пп. 1, 3 и 6) по сути своей являются результатами этой работы, а не собственно выводами и их переформулирование в выводы или даже удаление из списка выводов, на мой взгляд, никак не уменьшило достоинства этой работы. Кроме того, как это часто бывает и в других работах, в автореферате без какой-либо реальной необходимости широко используется англоязычная терминология (например, элиминация и, особенно, - валидация).

Автореферат диссертации написан хорошим научным языком и читается легко и с интересом. В целом работа производит хорошее впечатление, а

полученные результаты несомненно имеют не только значительное научное, но и практическое значение для создания высокоэффективных и достаточно безопасных лекарств нового поколения, обладающих антивирусной активностью против опасных инфекций ВИЧ-1 и SARS-CoV-2.

По моему мнению представленная Л.А. Столбовым диссертационная работа является законченной научно-квалификационной работой, отвечающей всем требованиям пп. 9 - 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г. (в редакции постановления Правительства Российской Федерации № 426 от 20.03.2021 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата биологических наук, а ее автор Столбов Л. А. заслуживает присуждения искомой степени кандидата биологических наук по специальности 1.5.8. – “Математическая биология, биоинформатика”.

28 сентября 2023 г.



Петухов Михаил Геннадьевич,
д.ф.-м.н., доцент, в.н.с.

Петербургский институт ядерной
физики им. Б.П.Константинова,
НИЦ «Курчатовский институт»
г. Гатчина, 188300, Ленинградская обл.,
Орлова роща,
тел: +7(921)751-5912
эл. почта: petukhov_mg@pnpi.nrcki.ru

