

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Перфильева Максима Алексеевича «Искусственные нейронные сети в поиске веществ с анксиолитической активностью», представленной на соискание ученой степени кандидата медицинских наук по специальностям 3.3.6. Фармакология, клиническая фармакология, 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

Актуальность диссертационного исследования обусловлена необходимостью разработки новых малотоксичных анксиолитических средств, обладающих высокой селективностью и благоприятным профилем безопасности. Современные терапевтические стратегии лечения тревожных расстройств, как правило, включают применение препаратов бензодиазепинового ряда, многие из которых проявляют нежелательные фармакологические эффекты, включая выраженную седацию и риск формирования зависимости. Кроме того, значительная индивидуальная вариабельность в ответе на терапию свидетельствует о потребности в новых химических структурах с оптимизированными свойствами.

Новизна диссертационной работы заключается в реализации принципов рационального молекулярного дизайна при помощи алгоритмов искусственных нейронных сетей, что позволило осуществить направленный *in silico* поиск перспективных соединений с анксиолитической активностью. Особое внимание уделено моделированию, нахождению зависимостей структуры–активность (SAR) и выявлению ключевых белков-мишеней центральной нервной системы. Полученные потенциальные анксиолитические соединения были протестированы в рамках *in vivo* доклинической валидации, что обеспечило доказательную оценку их биологического действия.

Практическая и теоретическая значимость работы заключается в создании структурированного и валидированного массива химических соединений с установленной анксиолитической активностью, что представляет собой ценную ресурсную платформу для дальнейших исследований в области медицинской химии по поиску психотропных веществ, в частности с анксиолитической активностью. Разработанная методология поиска и первичного скрининга соединений с психотропной активностью может быть адаптирована для проектирования других классов нейротропных агентов. Таким образом,

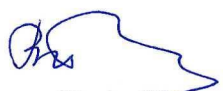
результаты исследования открывают новые направления в области дизайна и синтеза органических соединений, как с потенциалом анксиолитического действия, так и с другими видами фармакологической активности.

Диссертационное исследование Перфильева Максима Алексеевича «Искусственные нейронные сети в поиске веществ с анксиолитической активностью» отвечает требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а его автор заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата медицинских наук по специальностям 3.3.6. Фармакология, клиническая фармакология, 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

Доктор химических наук (02.00.03 – органическая химия;
02.03.08 – химия элементоорганических соединений)
профессор, заведующая кафедрой
медицинской химии и тонкого органического синтеза
химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова


Е.Р. Милаева

Кандидат химических наук (02.00.03 – органическая химия)
старший научный сотрудник ВАК (доцент),
заведующий лабораторией медицинской химии,
ведущий научный сотрудник
химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова


В.А. Палюлин

29 апреля 2025 года

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», Химический факультет
Адрес организации: 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, строение 3
Тел.: +7 (495) 939-35-71
E-mail: dekanat@chem.msu.ru
Официальный сайт: www.chem.msu.ru

