

Отзыв

на автореферат диссертации «Искусственные нейронные сети в поиске веществ с анксиолитической активностью», представленной на соискание учёной степени кандидата медицинских наук по специальностям 3.3.6. Фармакология, клиническая фармакология и 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика

Методология *in silico* прогнозирования биологической активности в настоящее время является одним из перспективных подходов к созданию новых лекарственных кандидатов с анксиолитическим действием. Поэтому работа Перфильева Максима Алексеевича, посвященная созданию расчетных методов выявления потенциальных анксиолитиков и экспериментальному тестированию перспективных по прогнозу соединений, несомненно, является актуальной и своевременной.

Перфильев М.А. в своем диссертационном исследовании сформировал верифицированную базу данных известных соединений с анксиолитической активностью, оптимизировал квантовохимическими методами структуры известных соединений с анксиолитической активностью и синтезированных соединений, определил биомишени, выполнил молекулярный докинг известных и новых химических соединений, сформировал обучающие, тестовые и прогнозные выборки на основе матриц аффинности молекулярного докинга и дополнительных дескрипторов, выполнил обучение искусственных нейронных сетей различной архитектуры, тестирование и оценку их прогностической точности, виртуальный скрининг новых структур, экспериментальное *in vivo* тестирование отобранных по результатам *in silico* прогнозов веществ, анализ *in silico* механизма действия соединения-лидера и определил его ADMET-характеристики.

Диссертант выполнил значительный объем экспериментальных исследований, его диссертационная работа соответствует критериям научной новизны и практической значимости.

Достоверность результатов, полученных Перфильевым М.А., подтверждается использованием комплекса современных экспериментальных и расчетных методов.

Основное содержание диссертации отражено в 12-х публикациях в журналах, рекомендуемых ВАК и индексируемых в международных базах данных. Получено свидетельство о регистрации базы данных.

Судя по реферату, диссертационная работа Перфильева М.А. "Искусственные нейронные сети в поиске веществ с анксиолитической активностью» выполнена на высоком научном уровне. По своей актуальности, научной новизне и практической значимости диссертация соответствует всем критериям, предъявляемым к кандидатским

диссертациям в соответствии с пп. 9-14 Положения о порядке присуждения учёных степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 с изменениями в Постановлениях Правительства РФ от: 21.04.2016 г. № 335; 02.08.2016 г. № 748; 29.05.2017 г. № 650; 20.03.2021 г. № 426; 26.10.2023 г. №1786, а ее автор, Перфильев Максим Алексеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата медицинских наук по специальностям 3.3.6. Фармакология, клиническая фармакология и 1.5.8. Математическая биология, биоинформатика.

Климочкин Юрий Николаевич



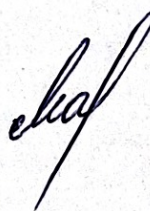
28.04.2025

профессор, доктор химических наук (специальность 02.00.03 Органическая химия)
заведующий кафедрой органической химии Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования Самарский государственный
технический университет
e-mail:klimochkin.yn@samgtu.ru тел.: 8(846) 332-21-22

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования «Самарский государственный технический университет»
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Подпись Климочкина Ю.Н. удостоверяется

Ученый секретарь СамГТУ, д.т.н.



Малиновская Ю.А.