

Отзыв на автореферат
диссертации Орлова Алексея Александровича
«ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО ПРОСТРАНСТВА ИНГИБИТОРОВ
РЕПРОДУКЦИИ ВИРУСА КЛЕЩЕВОГО ЭНЦЕФАЛИТА IN SILICO И IN VITRO»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 02.00.16 - Медицинская химия.

Вирусные заболевания человека представляют серьезную угрозу для общества. Каждый год обнаруживается все больше новых видов или штаммов вирусов. В настоящее время существует всего несколько примеров лекарственных препаратов, способных бороться с заболеваниями вызванными вирусами. Однако в их списке нет лекарств от вирусов поражающих ЦНС и мозг. Поэтому создание новых ингибиторов вирусов является важной задачей современной медицинской химии.

Соискатель в работе провел качественный обзор и анализ имеющихся препаратов с противовирусной активностью. Им выполнена трудоемкая работа по сбору данных для создания базы FlaviChEMBL. Соединения в собранной базе были систематически проанализированы и найдены закономерности в проявлении активности. Соискателем проведена экспериментальная работа с рядом соединений на клетках и показана активность некоторых из них. Также для удобства и визуальной наглядности, автором проведен анализ соединений FlaviChEMBL с применением технологии GTM, неоднократно показывавшей хорошие результаты в моделировании и представлении наборов молекул.

В целом работа выглядит цельной и законченной. Результаты были апробированы в докладах 9 конференций и опубликованы в 8 статьях. Однако к автореферату имеется несколько замечаний и вопросов:

1. На рис 3. (11 с.) приведена малоинформативная визуализация сети. Возможно стоило ее показать целой страницей в диссертации, но не небольшим изображением в автореферате.
2. Выбор производных нуклеозидов (13 с.) никак не обоснован. Источник соединений также не указан.
3. Объяснение активности соединений 124 и 129 (16 с.) только пространственное. Однако кратные связи имеют значительный вклад в электронную структуру связанных с ними аренов, что даже не рассматривалось.
4. Для карт GTM (21 с.) не указаны использованные дескрипторы молекул.

5. Нет объяснения выбора клеток СПЭВ (26 с.) для тестирования вирусных заболеваний, поражающих нервную систему.
6. Нет информации о доступе к FlaviChEMBL для анализа и воспроизведения результатов.

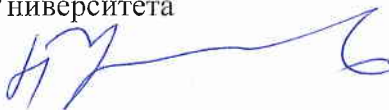
Однако вышеизложенные замечания и вопросы не снижают общую ценность работы Орлова А.А., удовлетворяющей всем требованиям, установленным пунктами 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842 предъявляемым к кандидатской диссертации, а ее автор, Орлов А.А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.16 - Медицинская химия.

с.н.с. отдела органической химии,

Химического института им. А.М. Бутлерова,

Казанского (Приволжского) Федерального Университета

к.х.н. Нугманов Рамиль Ирекович

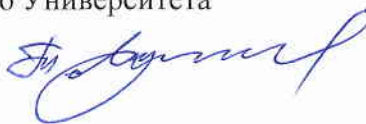


с.н.с. отдела органической химии,

Химического института им. А.М. Бутлерова,

Казанского (Приволжского) Федерального Университета

к.х.н. Маджидов Тимур Исмаилович



420008, г. Казань, Кремлевская 18.

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет.

Телефон: (843) 233-74-16

Факс: (843) 238-79-01

E-mail: dekanat7@kpfu.ru

16.09.2019

