

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Борисевич Софии Станиславовны «Алгоритм описания механизма противовирусной активности ингибиторов мембранных вирусных белков методами молекулярного моделирования», представленную на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.16. Медицинская химия

Диссертация Борисевич С. С. направлена на разработку методологии выбора биомишени среди мембранных вирусных белков, описания механизма противовирусного действия органических молекул и создания прогностической модели для оценки их физиологической активности. Актуальность данного исследования определена современными вызовами, обусловленными широким распространением различных вирусных инфекций и в первую очередь пандемией коронавирусной инфекцией 2019-nCoV. В связи с этим изыскания в области разработки новых действенных безопасных противовирусных агентов приобретает первостепенную важность.

В результате проведенного исследования автором получены значимые результаты как в теоретических, так и практических аспектах. Среди теоретических находок следует особо отметить обнаружение альтернативного сайта связывания ингибиторов гемагглютинаина вируса гриппа, а также описание при помощи молекулярного моделирования мультитаргетного действия на мембранные белки вируса гриппа каркасных производных на основе терпеновых соединений. Борисевич С.С. удалось, используя методы молекулярной метадинамики, объяснить механизм снижения патогенности камфецин-резистентного штамма вируса гриппа. Автором впервые выявлена взаимосвязь между химической структурой лигандов и фармакофорным профилем сайтов связывания ингибиторов поверхностных белков вируса гриппа, коронавируса SARS-CoV-2, вируса Эбола и РСВ, что может быть востребовано при поиске противовирусных агентов. В практическом плане должно выделить авторский подход к молекулярному моделированию, предложенный для изучения механизма противовирусной активности соединений и создания прогностической модели для оценки их фармакологического потенциала.

Высокий научный уровень выполненного исследования подтверждает опубликование по его результатам 26 статей в рецензируемых высокорейтинговых международных изданиях, среди которых 19 публикаций в журналах квартиля Q1 и Q2. Результаты работы были представлены в виде устных и пленарных докладов на международных и российских конференциях, что свидетельствует о хорошей апробации работы.

Достоверность результатов подтверждается найденными закономерностями между теоретическими и экспериментальными данными.

После ознакомления с работой возник ряд вопросов общего характера:

1. Можно ли применять разработанные теоретические подходы к оценке и прогнозированию других видов биологической активности?
2. На основании проведенных исследований можно ли получить основные рекомендации о необходимости присутствия структурных фрагментов в синтезируемых противовирусных агентах, наиболее благоприятно влияющих на противогриппозную и другого вида противовирусную активность?

В целом, следует высоко оценить своевременность, научную значимость диссертационной работы Борисевич С.С. и возможности дальнейшего применения результатов этого исследования и их развитие.

Диссертационное исследование Борисевич Софии Станиславовны на тему «Алгоритм описания механизма противовирусной активности ингибиторов мембранных вирусных белков методами молекулярного моделирования» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержится решение научной задачи по созданию механизмов оценки и прогнозирования противовирусного действия органических

соединений.

Представленная работа отвечает требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, и соответствует критериям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении учёных степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), а ее автор, Борисевич София Станиславовна – **заслуживает** присуждения ей учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.16. Медицинская химия.

Салоутин Виктор Иванович, член-корреспондент РАН, доктор химических наук (специальность 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений), профессор (специальность 02.00.03 – Органическая химия), главный научный сотрудник, заведующий лабораторией фторорганических соединений Института органического синтеза им. И. Я. Постовского Уральского отделения РАН e-mail: saloutin@ios.uran.ru, тел: +7(343)374-59-54.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН) 620137, Свердловская область, город Екатеринбург, улица Софьи Ковалевской, дом 22/20 e-mail: verbitsky@ios.uran.ru, тел: (343) 369-30-58, адрес сайта в сети Интернет: www.ios.uran.ru

Я, Салоутин Виктор Иванович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.1.192.02, и их дальнейшую обработку.

Салоутин Виктор Иванович

24.05.2024

Подпись Салютина Виктора Ивановича заверяю:

24 мая 2024 г.

Ученый секретарь ИОС УрО РАН, к.т.н.



Красникова О.В.