

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.

Диссертационное исследование является актуальным в свете высокой распространенности тревожных расстройств среди населения и ограниченных возможностей существующих фармакотерапевтических подходов. В условиях стремительного прогресса в области психофармакологии и молекулярной биологии возникает острая необходимость в разработке инновационных фармакологических агентов с высокой анксиолитической эффективностью и улучшенным профилем безопасности.

Разработка новых психотропных соединений сопряжена со значительными экономическими и временными затратами, а также требует проведения комплексных доклинических исследований. В связи с этим, возникает потребность в разработке более рациональных и экономически обоснованных методов поиска активных молекул. Применение современных вычислительных технологий, таких как искусственный интеллект и нейросетевые алгоритмы, предоставляет уникальную возможность для целенаправленного скрининга и оптимизации химических структур.

Научная новизна данного исследования заключается в интеграции методов молекулярного моделирования *in silico* с экспериментальными тестами *in vivo*, что позволяет значительно повысить точность и эффективность отбора потенциальных анксиолитических агентов на ранних стадиях разработки. Данный комплексный подход, впервые предложенный автором, представляет собой значительный прорыв в области фармакологии и открывает новые перспективы для создания более эффективных лекарственных средств.

Теоретическая и практическая значимость работы обусловлена разработкой и верификацией базы данных химических соединений с установленной анксиолитической активностью, а также формированием методологии для идентификации новых психотропных агентов. Полученные результаты имеют высокую значимость для психофармакологии, поскольку они позволяют усовершенствовать алгоритмы поиска, оптимизировать

процесс разработки и повысить эффективность создания новых анксиолитических препаратов.

Диссертационная работа производит хорошее впечатление, однако у меня есть вопрос:

Почему из всех параметров ADMET были рассчитаны только LD 50 и проницаемость через ГЭБ?

Также в тексте автореферата присутствуют нерасшифрованные аббревиатуры, причем некоторые из них на русском языке, а некоторые, как «ML» на английском.

Считаю, что диссертационная работа 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 её 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 (1.4.16. Медицинская химия)
ведущий научный сотрудник
лаборатории химической физики
УФИХ УФИЦ РАН

С. С. Борисевич

Подпись доктора химических наук Борисевич С. С. заверяю:

Ведущий специалист ОК Уфимского института химии УФИЦ РАН

«Вараксина А.Ф.»

2025 года

Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии
наук

Адрес организации: 450054, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект
Октября, д. 71

Тел.: +7 (347) 235-55-60

E-mail: chemorg@anrb.ru

Официальный сайт: http://ufaras.ru/?page_id=14041