

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА
на диссертацию Фединой Юлии Алексеевны
**«КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ МОДЕЛИ В КОРРЕЛЯЦИЯХ «СТРУКТУРА-
СВОЙСТВО» УГЛЕВОДОРОДОВ И ИХ ЗАМЕЩЕННЫХ»,**
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 02.00.04 - Физическая химия

Влияние строения молекул на их основных характеристик является одной из важнейших фундаментальных проблем современной химии. Она тесно связана с разработкой методов синтеза веществ с заданным набором физико-химических свойств. Для решения указанной выше проблемы используют количественные корреляции «структур - свойство» (QSPR), «структур - активность» (QSAR) и ряд других корреляций. При построении подобных корреляций, основанных на использовании экспериментальных данных, применяются различные характеристики структуры молекул, основанные на классических представлениях об их структуре, геометрии, распределении электронной плотности по данным современных квантово-химических расчетов, а также применение различных молекулярных дескрипторов, и в том числе топологических индексов. Одним из ведущих в нашей стране центров в изучении проблемы «структур - свойство» является Тверской государственный университет, на кафедре физической химии которого была выполнена рассматриваемая работа. В ТвГУ эти исследования были начаты почти 50 лет назад под руководством выдающегося ученого, одного из ведущих в нашей стране специалистов в области физической химии Юрия Григорьевича Папулова (1935-2016).

Работы профессора Папулова в области строения молекул, конформационного анализа, термохимии молекулярной спектроскопии широко известны в нашей стране и за рубежом и получили высокую оценку специалистов. Он внес также существенный вклад в ряд важных разделов математической химии, в частности, связанных с применением теории графов и теории групп для различных проблем физической химии. Одним из основных направлений исследований Ю.Г. Папулова было изучение закономерностей «структур - свойство» для различных классов органических соединений. Его докторская

диссертация «О закономерностях в теории зависимости свойств органических веществ от строения их молекул» (1969 г.) была одной из первых обобщающих работ в этом направлении.

Диссертационная работа Ю.А. Фединой была последним квалификационным исследованием, которым первоначально руководил профессор Папулов. В рассматриваемой работе обсуждается возможность использования нового топологического индекса в качестве дескриптора для описания ряда важных физико-химических свойств алканов, циклоалканов и ароматических углеводородов. Учитывая, что топологические индексы являются важным эффективным инструментом в построении корреляционных зависимостей «структура - свойство», и работы по их использованию и совершенствованию проводятся в лабораториях многих стран мира, **не вызывает сомнений интерес и актуальность темы диссертации Ю.А. Фединой.**

Рассматриваемая работа изложена на 151 странице, включает 45 рисунков и 20 таблиц, состоит из введения, 5 глав, в которых излагается основной материал диссертации, заключения и списка литературы, включающего 183 источника (в нумерации учитывается также 16 работ автора по теме диссертации). Во введении отмечается актуальность темы исследования; формулируется цель, задачи и научная новизна работы, личный вклад и участие автора в проведенном исследовании.

В первой главе рассматривается ряд вопросов, которые в дальнейшем используются для построения QSPR-моделей для алканов, циклоалканов, ароматических полициклических соединений. Среди них: основные положения графов для построения моделей «структура - свойство»; применение теории Д. Пойа для описания замещенных бензола; основные принципы метода QSPR; применение топологических индексов в качестве молекулярных дескрипторов; топологический индекс среднего размера. Изложенный материал не вызывает сомнений в квалификации автора; диссидентом приводится большое число ссылок на ряд важнейших литературных источников. Недостатком первой главы является отсутствие четкой структуры. Хотя диссидентом рассматриваются различные топологические индексы, в работе практически не обсуждаются их достоинства и недостатки.

Развиваемый в работе и используемый в дальнейшем топологический индекс среднего расстояния появляется совершенно неожиданно как *deus ex machina*, и ему уделяется менее одной страницы.

В главе 1 практически не обсуждается вопрос о физическом смысле топологических индексов, а также отсутствуют ссылки на несколько интересных исследований, в которых рассматривается ряд перспективных появившихся в последние годы направлений использования топологических индексов для решения проблемы QSPR. Среди них следует упомянуть серию работ В.Г. Урядова, обобщенных в двух его монографиях. Особый интерес представляет книга В.Г. Урядова «Движение молекул и свойства неэлектролитов» (Казань, Изд-во КНИТУ, 2016). Для построения корреляционных зависимостей QSPR с очень высокими характеристиками В.Г. Урядовым используется величина J_w – произведение молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени 2/3, которая может рассматриваться как характеристика момента инерции вращательного движения молекулы произвольного строения и состава, что свидетельствует об определенной степени упорядоченности движения молекул в жидкой фазе.

В первой главе отсутствует какое-либо заключение, наличие которого позволило бы четко сформулировать цель и основные задачи исследования. В рассматриваемой работе цель и задачи исследования практически не связаны с анализом литературы.

В главах 2 и 3 приводятся данные о построении QSPR-моделей с использованием ряда известных топологических индексов, а также с использованием предложенного в работе топологического индекса среднего расстояния соответственно для температур кипения и энталпий образования в газообразном состоянии молекул алканов и циклоалканов.

В главе 4 аналогичный подход распространен на энталпии образования в газообразном состоянии, температуры кипения и плавления, а также коэффициентам распределения в системе октанол-вода для полициклических ароматических углеводородов. В целом в главах 2-4 содержится большой по объему материал, представляющий значительный научный интерес и свидетельствующий о высокой квалификации соискателя. Вместе с тем, обращают

на себя внимание некоторые просчеты и неточности изложения. Так, например, без всякого ущерба для работы из параграфов 2.1 и 3.1 можно было исключить общеизвестный материал, соответственно об алканах и циклоалканах и оставить только, с минимальными комментариями, использованные в работе табличные данные. Общим недостатком глав 2-4 является отсутствие заключений по содержанию, где были бы сформулированы наиболее важные из полученных результатов. Кроме того, в тексте имеется значительное количество неточностей. Так, например, даже в заголовках таблиц встречаются названия «индекс среднего расстояния», «топологический индекс среднего расстояния» и т.д. Довольно часто встречаются неудачные выражения, например: «самый маленький из циклоалканов - циклопропан». В целом же следует отметить, что главы 2-4 написаны достаточно четко и логично.

Научная новизна работы определяется тем, что в ней разработан новый топологический индекс среднего расстояния; на примере углеводородов различного строения проведено подробное исследование его использования в корреляционных зависимостях «строение - свойство». Установлено, что данный индекс может быть использован для прогноза интенсивных и экстенсивных свойств молекул в однопараметровой и многопараметровой линейной регрессии. Отмечено, что изученные в работе QSPR-модели могут быть использованы для предсказания перспективных для синтеза структур с заданными свойствами, что имеет вполне очевидное практическое значение.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием для построения QSPR зависимостей широко известного и детально разработанного метода регрессионного анализа. Существенное значение имеет также то, что для построения корреляционных зависимостей были использованы выборки надежных экспериментальных данных большого размера и получены высокие значения их основных показателей. **Основные положения, рекомендации и выводы диссертации** однозначно следуют из результатов проведенного исследования.

Некоторые замечания по работе были сделаны при рассмотрении структуры диссертации. **В качестве дополнительных замечаний отметим следующие:**

1. Название диссертации является не вполне удачным вследствие своего слишком общего характера. Как уже отмечалось выше, корреляционные

зависимости «состав-свойство» могут быть настроены с использованием различных дескрипторов. В работе изучается возможность применения для этой цели топологических индексов, что целесообразно было отметить в названии. С другой стороны, углеводороды и их замещенные охватывают многие важнейшие разделы органической химии, в то время как в диссертации рассматриваются только алканы, циклоалканы и ароматические углеводороды, что также можно было упомянуть в названии диссертации или употребить, например, термин «некоторые».

2. Недостаточно четко сформулирована актуальность проведенного исследования, в частности, необходимость разработки и использования новых топологических индексов. В связи с этим в работе нет ответа на вопрос, какими особыми свойствами и преимуществами эти новые индексы должны обладать.

3. В ряде случаев не очень удачными являются формулировки выводов и положений, выносимых на защиту. Так, по нашему мнению, выводы 1 и 2 можно было без особого ущерба исключить, точно так же, как и п. 1 из положений, выносимых на защиту.

4. В ряде графиков и таблиц использована температура по Цельсию, хотя вполне очевидно, что в научных работах должна использоваться температура по Кельвину. Нет единства в единицах, использованных в энталпиях образования, наряду с джоулями использованы и калории (глава 4).

5. Не вполне понятно, почему в статьях по теме диссертации приводится работа: Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Федина Ю.А. Графические зависимости в изучении корреляций структура – энталпия образования хлорпроизводных алкилсиланов. В диссертации данных по этим соединениям нет.

6. В диссертации встречается значительное число стилистических неточностей, причем в ряде случаев они касаются рассмотрения ряда существенных моментов диссертации. Так, например, при описании цели работы мы встречаем следующую формулировку: «Для осуществления поставленной цели были осуществлены следующие задачи».

Перечень подобных неточностей можно было бы существенно увеличить. Более внимательное редактирование позволило бы их легко устраниТЬ. Встречаются в работе и отдельные опечатки, так, например, в диссертации и

автореферате утверждается, что объем диссертации составляет 130 стр., однако здесь не учитываются выводы и список литературы, вместе с которыми объем возрастает до 151 страницы.

Отмеченные замечания носят преимущественно технический характер и не затрагивают основные результаты, рекомендации и выводы диссертации и не влияют на общую положительную оценку работы в целом.

Диссертация Ю.А. Фединой является законченным актуальным исследованием, выполненным на современном теоретическом уровне. В работе получен большой по объему и интересный расчетный материал, который может быть использован при проведении исследований по проблеме «структура - свойство» для различных классов органических соединений. Существенное значение при проведении исследований по данной тематике имеет предложенный и обоснованный в диссертации новый топологический индекс. В ходе выполнения диссертационной работы Ю.А. Федина проявила себя как высококвалифицированный специалист в области физической химии.

Основные результаты диссертации изложены в достаточно большом числе статей, в том числе и в изданиях, рекомендованных ВАК. Они неоднократно докладывались на всероссийских и международных конференциях и получили признание специалистов. Автореферат и публикации достаточно полно и правильно отражают основное содержание диссертации.

Диссертационная работа Фединой Юлии Алексеевны является законченным научно-квалификационным исследованием, вносящим вклад в развитие физической химии органических соединений, так как содержит решение задач, связанных с изучением влияния молекулярной структуры на ряд важных свойств молекул таких, как энталпия образования, температура кипения, температура плавления алканов, циклоалканов и ароматических соединений. Предложенный в работе новый топологический индекс может быть использован и для решения ряда других задач физической химии.

Диссертация наделена признаками актуальности, научной новизны, практической значимости, обоснованности выводов и достоверности полученных результатов, удовлетворяющих критериям пп. 9 – 11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней, утвержденных положением Правительства РФ

№842 от 24 сентября 2013 года» и п. 2 паспорта специальности 02.00.04 – Физическая химия. В связи с вышеизложенным, считаю, что автор рассматриваемой работы Федина Юлия Алексеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Официальный оппонент:

Храпковский Григорий Менделеевич
доктор химических наук, профессор
кафедры катализа факультета наноматериалов и
нанотехнологий института нефти, химии и
нанотехнологии федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения высшего
образования «Казанский национальный
исследовательский технологический университет»

Г. Храпковский

/Г.М. Храпковский/

5/06/17



удостоверяется,

Начальник ОКИД ФГБОУ ВО «КНИТУ»

С.А. Перельгина
«05» 08 2012