

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН)
академик М.П. Егоров



ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Феединой Юлии Алексеевны «Количественные модели в корреляциях «структура–свойство» углеводов и их замещенных», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, химические науки.

Задача теоретических исследований по связи свойств органических соединений и структуры их молекул, так называемая проблема «СТРУКТУРА–СВОЙСТВО», является одной из главных задач теоретической химии, в том числе математической химии. Решение этой задачи могло бы дать возможность химикам не только облегчить экспериментальные работы по определению свойств синтезированных соединений, но и предсказывать структуру новых еще не синтезированных соединений с заранее заданными свойствами. Особенно важно это для медицинской химии при поиске биологически активных соединений и новых лекарственных средств. До окончательного решения проблемы методами математической химии, в том числе с применением теории графов, очень и очень далеко. Поэтому актуальность и практическая ценность таких работ, одной из которых является представленная диссертация, не вызывает никаких сомнений.

Основная цель работы состоит в следующем:

1. Разработка нового топологического индекса и применение его для описания ряда физико-химических свойств алканов и некоторых ароматических углеводов.
2. Сравнение степени адекватности различных топологических индексов рассматриваемым свойствам и графическое представление соответствующих зависимостей.
3. Расчеты значений энтальпии образования ряда полициклических ароматических углеводов, для которых доля изученных экспериментально соединений очень

мала по сравнению со всеми возможными соединениями, не только неизученными, но даже и не синтезированными.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Обоснование и систематизация подхода к расчету интенсивных и экстенсивных характеристик углеводородов и их замещенных.
2. Моделирование «структура–свойство» с использованием разработанного топологического индекса среднего расстояния.
3. Прогнозирование и анализ энтальпии образования объектов исследования и анализ тенденции изменения этих величин.

Степень достоверности результатов.

Достоверность результатов автора достаточно высока, поскольку все необходимые расчеты выполнены с применением вычислительных машин и стандартных программ.

Объем и структура диссертации.

Работа состоит из введения, 4^х глав содержания, выводов, списка опубликованной автором литературы из 7 работ и 9 опубликованных тезисов докладов на различных научных конференциях. Объем диссертации составляет 151 страницу, в том числе список использованной литературы (199 работ), 45 рисунков и 20 таблиц.

Глава I. Обычно в диссертации первая глава посвящается литературному обзору, но такового в данной работе нет. В ОТЗЫВЕ же о недостатках работы, как правило, указывается в конце. Учитывая это обстоятельство, мы отступим от традиций и заметим сразу, что все-таки не слишком справедливо не упомянуть первые работы, в которых предложено использование графов не только для предоставления структурных формул, но и для целей нахождения связи между структурой и свойствами. Конечно, сослаться на Эйлера (очень известный ученый, много сделавший в различных областях науки), который впервые в мире предложил и построил теорию графов, может быть и не обязательно, но все же сослаться на статьи, опубликованные в 1963-64 годах в журнале Физической химии (ЖФХ), а также на работы Гордона и Кеннеди, Руврэ и некоторых других очень бы не помешало. Точно также можно заметить, что в диссертации очень много и в различных аспектах употребляется понятие «топологический индекс», а первый ученый, предложивший этот термин, именно Хосойя, в диссертации не упоминается. Правда, его имя есть на стр. 14, но в другой связи и никаких ссылок нет. А ведь Хосойя сослался на упомянутые публикации в ЖФХ. Кстати, непонятно, почему первая, к сожалению и единственная, в списке опубликованных автором статей в ЖФХ, представлена на английском языке. Ведь этот журнал издается на русском

языке, а не на английском (журнал, конечно, переводится, но для нас он все же издается на русском языке).

Это, конечно, мелкие замечания, но существеннее то, что автор почти нигде не приводит формул, используемых для расчетов. Упомянутая «линейная регрессия» указывает на то, что эти формулы линейные, т.е. содержит 2 подгоночных параметра, но все же этого недостаточно. Правда, на стр.41 как-то невнятно учитывается «логарифм индекса», но этого мало. Непонятно, кем (авторами индексов или автором) получены изображенные на рисунках 2.1, 2.2, 2.3, 2.4 и т.д. вплоть до 2.13 зависимости. Дело в том, что один и тот же индекс может быть аргументом в самых различных формулах (линейных, квадратичных, логарифмических, тригонометрических и т.д. и т.п.) и при этом квадраты коэффициентов корреляции также могут очень существенно различаться. В одной из работ, опубликованных в журнале «Изв. АН.сер.хим.» выведены формулы, которые позволяют для любого индекса и любой выборки свойств без всяких расчетов (т.е. без формул для зависимостей «свойство-индекс») находить максимально возможное значение квадрата коэффициента корреляции. Это означает, что если эта величина мала, то и нет смысла пробовать различные варианты расчетных формул, а если эта величина достаточно велика, то можно попытаться найти оптимальную формулу.

Также представляется неудачным использование таких определений, как «тренировочный», «тестовый» «наборы». В русскоязычной литературе приняты такие термины: «обучающая», «контрольная» «выборки». Автор часто упоминает, что те 72 алкана, что представлены в табл. «2.1.1», делятся на две такие выборки, но нигде нет этого «разделения». Кстати, эта табл. «2.1.1» расположена в тексте очень неудачно: например, октаны разбросаны по трем страницам (32, 33 и 34), их номера от 22^{го} до 41^{го}, но в их порядок вклинились два нонана (39-и 40). Обозначение для 3^{го} номера в этой таблице не только ошибочно, но для химика режет слух: ведь это просто «изобутан»! Некоторые рисунки бессмысленны: например, «2.1.d», «2.2. d», «2.3.d», «2.4.a», «2.4.b», «2.4.d», «2.5.d», «2.6.d» и особенно «2.7.d», «2.8.d», «2.9.d», «2.10.d», «2.11.d», «2.12.d» и «2.13.d», поскольку они отражают практически полную неадекватность величин свойства и индексов.

Нельзя не обратить внимания на одно место, которое просто невозможно понять и оставить без внимания. На стр. 6 есть фраза: «Существует поверье, что все свойства молекул predeterminedены ее структурой, а установление...». Это подчеркнутое слово как будто взято из известной пьесы Грибоедова («Ох род людской, вошло ж в поверье...»). То, что все

свойства веществ определяются структурой молекул не только предположение, а тем более не «поверье», а факт, не вызывающий никаких сомнений.

Рассуждения автора, например, в начале главы 2 (пункт 2.1), не только некорректны, но и неуместны, ведь диссертация рассчитана на понимание химиков, имеющих соответствующее образование, а не на школьников. Кроме того, можно отметить и некоторую некомпетентность автора. Например, на стр.32 «поясняется», что начальные алканы есть газы, а «в твердом состоянии можно встретить молекулы с 17 и более атомами углерода». Это уже непростительная ошибка. Ведь есть соединение (2,2,3,3 – тетраметилбутан) всего с восемью атомами углерода, которое имеет температуру плавления $+100,7^{\circ}\text{C}$! Т.е. оно не плавится даже в кипящей воде. Откуда взялось число 17 – непонятно! Кстати, температура плавления – самое сложное свойство для построения моделей «Структура–Свойство». Нет ни одной статьи и даже попытки построить сколько-нибудь удачную расчетную схему для этого свойства. В статье в журнале «J.Ch.Inf.Comp.Sci» авторы, пытаясь построить такую схему, просто постулировали исключение из рассмотрения этого изооктана. Поэтому попытки автора диссертации построить такую модель (гл.4) заведомо обречены на провал, ибо если нельзя построить модель даже для простейшего класса (алканов), то претензии автора не имеют перспектив. Это видно, кстати, из рассмотрения табл. 4.1.1 (стр. 79). Например, изомеры 2,6- и 1,7-диметилнафталина различаются по т.пл. на 124°C (!), изомеры 2,3,5- и 2,3,6-триметилнафталины – на 76°C ! **Никакие** топологические индексы не смогут учесть эти различия. Поэтому автор должен был бы об этом подумать, это в литературе обсуждалось.

Тем не менее, несмотря на отмеченные недостатки, работу следует оценить положительно. Проанализированы и представлены зависимости ряда свойств предельных углеводородов от известных топологических индексов. Составлены соответствующие таблицы и рисунки. Главный результат состоит в том, что разработан принципиально новый топологический индекс, который для некоторых свойств (исключение – температура плавления) имеет очевидные преимущества перед известными индексами. Материалы диссертационной работы представлены в виде 7 статей и 9 опубликованных тезисов докладов на различных научных конференциях. Автореферат и публикации вполне отражают содержание диссертации. Научные результаты, полученные диссертантом, представляют интерес для теоретической химии.

По актуальности, объему выполненных работ, новизне и теоретической значимости полученных результатов диссертационная работа Феединой Юлии Алексеевны «Количественные модели в корреляциях «структура–свойство» углеводородов и их

замещенных» **соответствует** требованиям п. 8 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 30 января 2002 г. № 74, и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия, химические науки, а её **автор заслуживает** присвоения искомой учёной степени.

Отзыв составлен ведущим научным сотрудником Лаборатории математической химии и компьютерного синтеза (лаб. № 44) ИОХ РАН, кандидатом химических наук Смоленским Евгением Анатольевичем и утверждён на совместном коллоквиуме лаборатории № 44 (Математической химии и компьютерного синтеза) и лаборатории № 40 (Лаборатория каталитических реакций окислов углерода), протокол № 353 от 15 мая 2017 г.)

Председатель коллоквиума
чл.корр. РАН, зав. лаб. № 40


А. Л. Лapidус

Секретарь коллоквиума
научный сотрудник, к.ф.-м.н.


И. В. Чуваева

Ведущий научный сотрудник ИОХ РАН,
кандидат химических наук


Е. А. Смоленский

Ленинский проспект, д. 47, Москва, 119991

8(499)137-29-44

Fax. 8(499)135-53-28

SECRETARY@ioc.ac.ru

Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт органической
химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук
(ИОХ РАН)

Ученый секретарь ИОХ РАН им Н. Д. Зелинского РАН,
кандидат химических наук


К. ф.-м. н. И. В. Чуваевой
заверяю
И. К. Коршевец

