

## Отзыв

на автореферат диссертации 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

Работа Феединой Ю.А. посвящена моделированию физико-химических свойств алканов, циклоалканов и полициклических углеводов с учетом топологии молекул. Количественное моделирование взаимосвязи «структура-свойство», прогнозирование свойств молекул и определение структур с заданным набором свойств является актуальной и важной задачей современной науки. Эти методы внедрены в различные индустриальные секторы. Исследование корреляций «структура-свойство» является продолжением направления, осуществляемого на кафедре физической химии ФБГОУ ВО «Тверской государственный университет».

В работе предложен новый топологический индекс среднего расстояния, построенный с использованием матрицы расстояния молекулярного графа. Для определения прогностических способностей разработанного дескриптора применяется линейно-регрессионный статистический анализ, где в полном объеме осуществляется процесс построения двумерных графиков, анализ отклонений, расчет статистических параметров регрессии, включая стандартное отклонение, коэффициент корреляции и коэффициент детерминации. В итоге очевидна высокая дискриминирующая способность разработанного топологического индекса. Работа также содержит сравнительный анализ точности расчетных величин энтальпии образования полициклических ароматических углеводов с популярными аддитивными схемами, которым топологический индекс не уступает в качестве.

Автореферат диссертационной работы Феединой Ю.А. дает всестороннее представление о диссертационной работе, представляет всю необходимую информацию, указывая на новизну и теоретическую обоснованность.

Недостатки работы незначительны и имеют редакционный характер. Например, количество опубликованных статей указано 8, но опубликовано только 7.

Указанные замечания не касаются основного содержания работы. Диссертация Феединой Ю.А. «Количественные модели в корреляциях «структура-свойство» углеводов и их замещенных» по своей актуальности, научной и практической значимости и новизне соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г.), а Феединой Юлия Алексеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Доцент кафедры общей химии факультета ФМ и ЕН ФБГОУ ВО «РУДН», кандидат химических наук

М.А.Рябов

Собственноручную подпись доцента М.А. Рябова удостоверяю  
Ученый секретарь Ученого Совета РУДН, профессор

В.М.Савчин

Контактные данные: Рябов Михаил Алексеевич, доцент кафедры общей химии факультета ФМ и ЕН ФБГОУ ВО «РУДН», кандидат химических наук. Почтовый адрес РУДН: 117198, ул. Миклухо-Маклая, д.6. Телефон 8(495)9550977. e-mail: maryabov@mail.ru