

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Фединой Юлии Алексеевны на тему:
"Количественные модели в корреляциях "структура-свойство" углеводородов и их
замещенных", представленной на соискание
ученой степени кандидата химических наук по специальности
02.00.04 – Физическая химия**

Судя по автореферату, Юлия Алексеевна Федина является достойнейшим представителем чрезвычайно авторитетной во всем мире Тверской научной школы нашего незабвенного Юрия Григорьевича Папулова – сплавившей воедино расчётные методы математической химии и химическую топологию в целом с химией физической. – Начав публиковаться с ним сначала по теории симметрии графов (прежде всего, алканов) ещё с конца 80-х, закономерным и правильным сейчас выглядит выбор ее диссертационной темы как актуально современного междисциплинарного исследования корреляционных соотношений "структура-свойство" на расширенной углеводородной базе – включающей алканы и замещенные, и циклические, а также ароматику полициклическую – где в качестве обобщенного информационного стандарта в работе остроумно выбрана гипотетическая $3 + 4 + 5 = 12$ -кольцевая "молекула ПАУ" – Рис. 4 (с. 13) – причём в широком ряду их физических свойств – температур плавления и кипения, энтальпий образования в газовой фазе, а также коэффициентов распределения в системе октанол-вода.

Несомненная достоверность всех проведенных Ю.А.Фединой расчётов своего нового топологического индекса ("среднего расстояния" D_{ADPI}) отлично подтверждается самосогласованной его сопоставимостью с широким кругом индексов других видов, где он всегда показывает высокую и разборчивую свою добротность. А математически-ориентированному химику и топологу химическому никак не пройти мимо таких показательных находок Ю.А.Фединой, как обнаружение ею в своей работе целого ряда тонких явлений сходств или различий (в корректно сопоставимых условиях) между стандартными полиномиальными формами привычных топологических индексов (типа Винера, Рандича, Балабана) и их степенными формами – или введение в оборот для своих индексов среднего

