

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
02.00.04 – Физическая химия

Современные исследования в области фармакологии, медицинской химии, токсикологии и органической химии в последние десятилетия активно используют теоретические подходы, включая компьютерное моделирование и попытки предсказания свойств новых соединений в целевых реакциях или их воздействии на целевые мишени. Учитывая, что синтез вещества может быть дорог, определение его свойств без проведения вещественных экспериментов является важным и, зачастую, оправданным подходом, особенно в областях медицинской химии и токсикологии. В связи с чем, тема диссертационной работы является считаться актуальной.

Целью работы Феединой Ю.А. являлось исследование возможности разработки и имплементации нового дескриптора QSPR-моделирования в виде топологического индекса для предсказания значений интенсивных и экстенсивных характеристик углеводов.

В качестве объектов исследования автором выбраны алканы, циклоалканы и полициклические ароматические углеводороды, а экзаменуемыми свойствами – температура плавления, температура кипения, коэффициент распределения октанол/вода, энтальпия образования в газовой фазе. В ходе исследования предложен и апробирован топологический индекс среднего расстояния. Контрольными параметрами в исследовании послужили известные топологические индексы. На базе предложенного индекса разработаны и протестированы соответствующие модели, которые подтвердили дискриминирующую способность индекса среднего расстояния.

Полученные в ходе исследования данные опубликованы в 5 статьях в журналах, рекомендованных ВАК, доложены на ряде конференций и не вызывают сомнений в своей достоверности.

В ходе ознакомления с текстом автореферата возникли следующие замечания и вопросы:

1. В качестве объектов исследований выбраны тривиальные, широко исследованные системы. Возможно, было бы интереснее провести исследование гетероароматических систем, спиртов и замещенных аминов, широко востребованных в современной исследовательской практике.
2. Предложенная модель на основе разработанного дескриптора для описания температуры кипения, судя по рис.1b, имеет тот же недостаток, что и модель с индексом Винера: плохое описание температуры кипения высококипящих алканов. Нужно понимать, что при создании таких зависимостей они используются не для качественного описания ряда, а ориентируются на конечного пользователя – исследователя, для которого получение максимально приближенного к истине результата для необходимого ему соединения может быть критически важно. В связи с этим, необходимо установить границы применимости модели, в том числе температуры, при которых в значительной степени происходит деструкция цепи молекулы, а не испарение вещества.

Приведенные замечания не затрагивают существа работы и носят дискуссионный характер. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне и полностью соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п.9 «Положения о порядке присуждения ученых

степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а ее автор – Федина Юлия Алексеевна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

д.х.н., профессор,
заместитель проректора по научной работе
ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Сулман Михаил Геннадьевич

170026, г. Тверь, наб. А. Никитина, 22
+74822789317
sulman@online.tver.ru

Подпись М.Г. Сульмана заверяю,
Ученый секретарь ФГБОУ ВПО «ТвГТУ»
д.т.н., профессор

Дата



А.Н. Болотов