

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации *Фединой Юлии Алексеевны*  
«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.

Работа *Фединой Ю.А.* посвящена прогнозированию физико-химических и термодинамических свойств соединений с применением топологических индексов в качестве молекулярного дескриптора. QSPR-направление несомненно является актуальным. Оно стало темой многих исследований кафедры физической химии ФБГОУ ВО «Тверской государственной университет». В работе разработан и проверен топологический индекс среднего расстояния, который показал довольно высокую корреляцию в моделях прогнозирующих свойства представителей трех классов органических соединений. Результаты расчетов сопоставлены со своими аналогами, полученными по аддитивным схемам, и указывают на конкурентоспособность предложенных моделей.

Автореферат диссертационной работы *Фединой Ю.А.* полностью отражает содержание диссертационной работе, представляет весь необходимый материал, позволяющий увидеть новизну и теоретическую значимость.

Недостатки работы незначительны. Например, разработка двух топологических индексов создала бы более равноценную ситуацию для проверки их прогностической способности наряду с известными индексами. QSPR—модели, представляющие многолинейную регрессию, имеют лучшие статистические параметры — выше коэффициент корреляции и меньше среднеквадратичное стандартное отклонение.

Отмеченные замечания не снижают общей положительной оценки работы и носят консультативный характер. Учитывая актуальность темы диссертации, новизну и практическую значимость, считаю, что работа *Фединой Ю.А.* «Количественные модели в корреляциях «структура-свойство» углеводородов и их замещенных» в полной мере удовлетворяет 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 *Федина Юлия Алексеевна* заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заведующий лабораторией гель-технологии  
АО ВНИИСВ, г. Тверь  
доктор химических наук  
Тел.: 89038095225, e-mail: [GTN.tver@mail.ru](mailto:GTN.tver@mail.ru)



В.П. Галицын