

## ВІДГУК

- офіційного опонента на дисертацію Мокшиної Олени Георгіївни «Критичні властивості та другі віріальні коефіцієнти органічних речовин та їх сумішей. QSPR аналіз з урахуванням міжмолекулярних взаємодій», що подана на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.03 – органічна хімія

### Актуальність обраної теми дисертації

Однією з найважливіших задач сучасної хімічної науки є встановлення залежностей між структурою та властивостями речовин. Оскільки кількість нових синтезованих органічних сполук постійно збільшується, досить важливим завданням є кількісне прогнозування конкретних властивостей для нових, ще не синтезованих речовин, на підставі певних фізико-хімічних параметрів окремих сполук. Застосування методів QSAR/QSPR дозволяє значно скоротити час і ресурси і здійснювати більш цілеспрямований синтез речовин з необхідним заданим комплексом властивостей.

Прогнозування термодинамічних властивостей органічних речовин є перспективним напрямком у галузі QSAR/QSPR. Більша частина технічних носіїв, які використовуються в практичних завданнях є суміші, тому встановлення кількісних співвідношень "структура-термодинамічні властивості" для сумішей безумовно є актуальним завданням.

Співробітниками відділу молекулярної структури і хемоінформатики Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України накопичено значний досвід зі створення та застосування QSAR/QSPR моделей, включення даної роботи до завдань відомчих тем НАН України є додатковим підтвердженням її актуальності.

### Ступінь обґрунтованості наукових положень, сформульованих в дисертації, їх достовірність і новизна

Мокшиною О.Г. виконано комплекс досліджень, спрямованих на створення системи дескрипторного опису з урахуванням можливих міжмолекулярних взаємодій в індивідуальних речовинах та в сумішах сполук і її використання для вирішення низки QSAR/QSPR задач.

Розроблені автором моделі дозволили дослідити вплив будови індивідуальних органічних сполук та компонентів сумішей на критичні властивості, фактор Пітцера та другі віріальні коефіцієнти.

До результатів, які характеризуються безперечною науковою новизною, слід віднести:

- Розробка нових дескрипторних підходів, що допомагають більш глибоко описати природу досліджуваних речовин;
- Виявлення найважливіших структурних та фізико-хімічних факторів, що впливають на досліджувані термодинамічні властивості;
- Використання «двошарового» підходу для фізично обґрунтованого моделювання других віріальних коефіцієнтів.

В роботі особливу увагу приділено оцінці прогнозуючої здатності запропонованих моделей, що дає підставу стверджувати про достовірність наведених даних. Наукові положення, сформульовані в дисертації, є теоретично обґрунтованими, розроблена експертна система дає підґрунтя для цілеспрямованого пошуку нових технічних агентів.

### Повнота викладення результатів в опублікованих за участю автора роботах

За темою дисертації опубліковано 17 робіт, у тому числі 7 статей в спеціалізованих фахових виданнях. Всі основні положення дисертації в повній мірі відображені в опублікованих за участю автора роботах. Результати роботи пройшли достатню апробацію на наукових конференціях різного рівня.

Автореферат дисертації є ідентичним за своїм змістом до основних положень дисертації.

### Зауваження до змісту дисертації

1. Дисертантом детально вивчено дві групи властивостей – це критичні властивості та другі віріальні коефіцієнти. При цьому разом з першою групою властивостей дисертант досліджує фактор Пітцера. Хоча зазначено, що він розрахунково зв'язаний з критичними властивостями, було би доцільно винести цю задачу в окремий розділ. Тим більше, що каузальні методи, які там використовуються, представляють окремий інтерес.

2. Дисертант описує процедуру т.з. “data curation”, при цьому зазначає, що проводилася також процедура стандартизації. Бажано було б більш детально описати, як саме проходила стандартизація хімічних структур.

3. Дисертантом було використано декілька популярних сучасних алгоритмів машинного навчання. Але, наприклад, при аналізі моделей для критичних властивостей індивідуальних речовин згадуються тільки RF моделі, в той час як для моделювання критичних властивостей бінарних сумішей не використано метод GLM.

4. Дисертація та автореферат досить добре оформлені і опонент знайшов незначну кількість помилок:

- в дисертації (стор. 27) заголовок знаходиться наприкінці сторінки, можна було перенести його на наступну;

- в дисертації (стор. 28) пропущена літера в слові «для»;

- в дисертації (стор. 41) до таблиці залишено занадто багато порожнього місця, там можна було б продовжити текст;

Висловлені зауваження здебільшого мають технічний характер та відбивають суб'єктивну думку опонента і не піддають сумніву принципові положення дисертаційної роботи.

### Висновок

Дисертація Мокшиної О.Г. є закінченим науковим дослідженням, містить низку нових наукових результатів, розв'язуючих актуальну наукову задачу розробки методики встановлення кількісних залежностей між структурою, складом та властивостями сумішей речовин.

За новизною отриманих результатів, їх науковому рівню і практичній значимості дисертаційна робота Мокшиної Олени Георгіївни відповідає всім вимогам МОН України до дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук, та п.11 вимог про «Порядок присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника» постанови № 567 Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 р., а її автор заслуговує присудження наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.03-органічна хімія.

Офіційний опонент, доктор хімічних наук  
(спеціальність 02.00.03 – органічна хімія),  
професор, завідувач кафедри органічної хімії  
Дніпропетровського національного університету  
імені Олеся Гончара

 С.І.Оковитий

Підпис завідувача кафедри органічної хімії  
ДНУ ім. Олеся Гончара Оковитого С.І. засвідчую:  
Вчений секретар ДНУ ім. Олеся Гончара, професор

 В.В. Лобода

