

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

Прогнозування термодинамічних властивостей хімічних речовин є нелегкою справою. Молекули є досить складними об'єктами адекватне описання яких за допомогою математичних методів потребує значних зусиль. Термодинамічні властивості є вдалим об'єктом дослідження, бо вони визначаються з високою експериментальною точністю. Крім того, термодинамічні властивості є безпосередньо зв'язаними з енергією міжмолекулярних взаємодій. Це дає можливість розробки новітніх дескрипторних підходів, здатних більш детально описувати природу і можливі взаємодії досліджуваних речовин. Саме цьому присвячена дана дисертаційна робота.

Робота виконувалася відповідно до планів відомчої тематики відділу молекулярної структури і хемоінформатики ФХІ ім. О. В. Богатського НАН України.

Дисертація побудована традиційно. Перший розділ присвячений огляду існуючих робіт, присвячених розрахунковому прогнозуванню термодинамічних властивостей індивідуальних речовин та їх сполук. У розділі проаналізовано переваги і недоліки існуючих підходів, зокрема методів групових вкладів, рівнянь стану та небагатьох QSPR досліджень. У розділі описано також усю технологію вирішення задач QSAR/QSPR, включаючи вибір дескрипторів, валідацію отриманих моделей, коротко описано використання математичні та статистичні методи.

Другий розділ присвячено розробленим дескрипторним системам для вирішення завдань QSAR/QSPR. У цьому розділі описано «псевдосумішевий» підхід та дескриптори парної міжмолекулярної взаємодії, а також проведені модифікації існуючого сумішевого симплексного підходу.

Третій розділ присвячено саме використанню розробленої технології при вирішенні конкретних задач прогнозування критичних властивостей, фактора Пітцера та других віріальних коефіцієнтів.

В усіх випадках за допомогою підходів, описаних у розділі 2 було побудовано моделі, що адекватно описують відповідні властивості як індивідуальних сполук так і їх сумішей. Використання універсального фрагментного підходу дозволяє також досить успішно

вирішувати зворотну задачу, тобто визначати фрагменти молекул, що впливають на відповідну термодинамічну властивість.

Основні результати роботи викладені у висновках, котрі повністю відповідають отриманим результатам.

Зауважень принципового характеру до дисертації не маю, але в роботі є певні неточності і місця де можна було-би викласти матеріал у більш розширеному вигляді:

- При структурній інтерпретації критичних температур показано, що атом фтору має найбільший негативний вплив. Дисертант робить висновок про зв'язок негативного впливу із збільшенням здатності фторовмісних молекул до відштовхування. Але ж для галогеновмісних сполук характерні зокрема притягальні взаємодії зв'язки галоген-галоген. Наскільки коректним є зроблений висновок?
- При побудуванні моделей дисертантом не були використані процедури попереднього відбору параметрів. Чи не вплинуло це на якість моделей?
- Таблиця 7 показує приклади найбільш важливих «псевдосумішевих» дескрипторів. Враховуючи, що опис типів наведено у розділі 1.03.02, доцільно було б обмежитись перерахуванням типів у тексті або в меншій таблиці;
- Нумерація розділів не співпадає в дисертації та авторефераті. Наприклад, в дисертації розділ щодо других віріальних крос-коефіцієнтів індивідуальних органічних речовин має номер 3.5, в авторефераті – 3.2.01;
- На рис.1 в якості симплекса для індивідуальної сполуки вказано незв'язний фрагмент. Бажано додати більш детальні пояснення, як саме відрізняються незв'язані фрагменти для індивідуальних сполук та сумішей;
- В таблиці 1 малюнки симплексів перебивають розділові лінії самої таблиці;
- При описі методів групових вкладів приклади груп наведено не для всіх методів;
- При описі статистичних характеристик моделей використовуються два різних типи позначень для експериментальних та спрогнозованих значень y . В одному випадку - y_{obs} та y_{pred} , в іншому – y та \hat{y} ;
- При аналізі вихідних вибірок вказано, що вибірки містять зокрема сульфуровмісні та оксигеновмісні сполуки. Враховуючи різноманіття таких сполук, було б доцільно в тексті дисертації вказати, які саме класи вивчалися;
- При описі структурної інтерпретації використовуються різні позначення для аліфатичних фрагментів. В таблиці 15 – АЛ, в таблиці 4 – А1.

Вважаю, що представлена дисертація є завершеною науково-дослідною роботою, яка відповідає всім вимогам, що висуваються до кандидатських дисертацій. Автореферат та наведені у ньому публікації повністю відповідають змісту дисертації. Рівень публікацій

матеріалів роботи у фахових виданнях та апробація результатів на міжнародних конференціях також засвідчують відповідність представленої роботи вимогам щодо кандидатських дисертацій, а її автор – Мокшина Олена Георгіївна заслуговує присудження наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.03 – органічна хімія.

Офіційний опонент

старший науковий співробітник

Інституту біоорганічної хімії

та нафтохімії НАН України

кандидат хімічних наук

 В.Ю. Танчук

