

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертацию Владимировой Надежды Игоревны на тему: «Подходы QSPR в аналитической химии: in silico прогнозирование свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей»

Владимирова Надежда Игоревна выполнила выпускную квалификационную работу на тему «Подходы QSPR в аналитической химии: in silico прогнозирование свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей». Работа посвящена актуальной и практически значимой проблеме разработки новых материалов для решения задач химического анализа.

В ходе исследования автор провела комплексный анализ составляющих подхода QSPR, выявила наиболее оптимальные дескрипторы и математические методы для решения практических задач аналитической химии. На основе этого анализа были разработаны и проверены новые QSPR-модели, демонстрирующие высокую прогностическую способность.

**Научная новизна** исследования заключается в разработке и валидации QSPR-моделей для прогнозирования свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей на основе анализа малых наборов данных, характерных для аналитической химии. Впервые были получены модели, позволяющие прогнозировать селективность карбонатных потенциометрических сенсоров и физико-химические свойства ГЭР на основе холин хлорида.

**Практическая значимость** работы заключается в возможности использования разработанных моделей для ускорения и оптимизации процесса поиска новых ионофоров и компонентов глубоких эвтектических растворителей с заданными свойствами, что может привести к созданию новых сенсоров и растворителей с улучшенными характеристиками для применения в аналитической химии, экологическом мониторинге и других областях.

В процессе выполнения работы Владимирова Надежда Игоревна продемонстрировала глубокое понимание предмета исследования, умение работать с научной литературой и анализировать данные. Работа отличается достаточным уровнем самостоятельности и инициативности автора и соответствует требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам.

В целом, выпускная квалификационная работа Владимировой Надежды Игоревны представляет собой законченное исследование, выполненное на хорошем научном уровне. Рекомендую её к защите.

Научный руководитель:  
доктор химических наук, профессор  
кафедры аналитической химии Института  
Химии СПбГУ



Д.О. Кирсанов



17.05.2024

Личную подпись  
И.О. начальника отдела кадров №3  
И.И. Константинова

