

УТВЕРЖДАЮ  
Директор Института химии  
Санкт-Петербургского государственного  
университета

 Балова И.А.

« 17 » сентября 2024 г.  
М.П.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Диссертация на соискание учёной степени кандидата химических наук «Подходы QSPR в аналитической химии: in silico прогнозирование свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей» выполнена на кафедре аналитической химии Института химии Санкт-Петербургского государственного университета.

Научным руководителем кандидатской диссертации является доктор химических наук, профессор Кафедры аналитической химии Института химии Санкт-Петербургского государственного университета Кирсанов Дмитрий Олегович.

Диссертационная работа Владимировой Надежды Игоревны представляет собой исследование, посвящённое разработке и валидации QSPR-моделей для прогнозирования свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей. Интерес Надежды Игоревны сосредоточен на разработке новых подходов к QSPR-моделированию, способных работать с ограниченными наборами данными – такая задача актуальна для аналитической химии, где сбор больших выборок затруднен. Эти подходы могут существенно ускорить разработку новых химических сенсоров (ионоселективных электродов) для определения различных аналитов при решении задач экологического мониторинга, медицинской диагностики и в других областях. Кроме того, такие подходы могут способствовать разработке новых глубоких эвтектических растворителей (ГЭР). QSPR-моделирование позволит прогнозировать свойства аналитических систем на основе структуры органических молекул в их составе, что существенно упростит поиск оптимальных систем для конкретных применений, чем обуславливается *актуальность данной работы*.

Основной *целью* исследования были разработка и проверка QSPR-моделей, адаптированных для работы с ограниченными наборами данных, для прогнозирования свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей.

Для достижения цели были поставлены и успешно решены следующие *задачи*:

1. Разработка QSPR моделей для прогнозирования селективности потенциометрических сенсоров к гидрофильным анионам карбоната на основе ионофоров с акцепторными заместителями вблизи карбонильной группы;
2. Разработка QSPR моделей для прогнозирования чувствительности потенциометрических сенсоров к катионам тяжелых металлов ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ) на основе дифенилфосфорил ацетамидных ионофоров;
3. Разработка QSPR моделей для прогнозирования плотности, проводимости и вязкости ГЭР на основе холин хлорида с органическими кислотами в качестве доноров водородной связи.

Соискатель внес существенный *личный вклад* в проведение исследования, включая сбор и анализ литературных данных, разработку дизайна исследования, проведение квантово-химических расчетов, построение и проверку QSPR моделей, анализ полученных результатов, формулировку выводов и подготовку научных публикаций. *Новизна* работы

заключается в разработке новых подходов к QSPR моделированию, адаптированных для работы с ограниченными наборами данных, и применении этих подходов для решения актуальных задач аналитической химии.

Разработанные QSPR модели имеют высокую *практическую значимость*, поскольку позволяют прогнозировать свойства ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей, не проводя реального лабораторного эксперимента, что существенно ускоряет и удешевляет процесс разработки новых материалов с заданными характеристиками.

Работа вносит вклад в развитие QSPR подхода в аналитической химии, демонстрируя его эффективность при работе с малыми обучающими выборками и предлагая способы проверки моделей в условиях ограниченной доступности экспериментальных данных.

*Достоверность* полученных результатов подтверждается использованием надежных методов моделирования и проверке моделей на независимых тестовых наборах. Помимо этого, работа прошла апробацию, результаты представлены в трёх рецензируемых научных статьях и на четырёх международных конференциях.

Публикации:

1. Vladimirova, N., Polukeev, V., Ashina J., Babain V., Legin, A., Kirsanov, D. Prediction of Carbonate Selectivity of PVC-Plasticized Sensor Membranes with Newly Synthesized Ionophores through QSPR Modeling (2022) Chemosensors, 10(2), 43. DOI: 10.3390/chemosensors10020043

2. Vladimirova N., Puchkova E., Dar'in D., Turanov A., Babain V., Kirsanov D. Predicting the Potentiometric Sensitivity of Membrane Sensors Based on Modified Diphenylphosphoryl Acetamide Ionophores with QSPR Modeling (2022) Membranes, 12(10), 953. DOI: 10.3390/membranes12100953


3. Vladimirova N., Bochko T., Shishov A., Dmitry Kirsanov. Predicting the properties of deep eutectic solvents based on choline chloride and carboxylic acids and their mixtures with water using QSPR approach (2024) Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 692. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2024.133961

Эти публикации в достаточной степени отражают содержание диссертации и подтверждают научную новизну и практическую значимость полученных результатов.

В целом, диссертация представляет собой оригинальное и завершенное научное исследование, имеющее важное теоретическое и практическое значение. Работа «Подходы QSPR в аналитической химии: *in silico* прогнозирование свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Аналитическая химия.

Диссертация соответствует критериям, установленным в соответствии с Федеральным законом «О науке и государственной научно-технической политике».

Доктор химических наук, профессор

  
/ Ермаков С.С.  
(подпись)

