

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Мерещенко Андрея Сергеевича на диссертационную работу Владимировой Надежды Игоревны на тему «Подходы QSPR в аналитической химии: *in silico* прогнозирование свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей» представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Аналитическая химия

В представленной диссертационной работе Владимировой Надежды Игоревны рассматриваются методы QSPR-моделирования, применяемые для прогнозирования потенциометрической селективности и чувствительности сенсоров, а также физических свойств глубоких эвтектических растворителей. Работа представляет собой междисциплинарное исследование на стыке аналитической химии, материаловедения и хемоинформатики, направленное на создание математических моделей, позволяющих предсказывать ключевые свойства химических систем на основе их молекулярной структуры. Применение таких подходов в аналитической химии открывает новые возможности для рационального дизайна сенсорных материалов и растворителей, сокращая необходимость в дорогостоящих и времязатратных экспериментальных исследованиях.

Актуальность исследования обусловлена растущей потребностью в эффективных и высокоселективных сенсорах для контроля состава природных, технологических и биологических сред. Потенциометрические сенсоры на основе пластифицированных мембран находят широкое применение в аналитической химии, однако разработка новых ионофоров с заданными характеристиками представляет собой сложную задачу, требующую значительных затрат времени и ресурсов. В этом контексте использование методов QSPR-моделирования является перспективным подходом, позволяющим направленно искать структуры для разработки сенсоров с необходимыми свойствами. Аналогичным образом, глубокие эвтектические растворители представляют собой класс экологически безопасных и функционально гибких растворителей, свойства которых зависят от состава. Применение математических моделей для прогнозирования их характеристик позволяет оптимизировать их состав под конкретные задачи, что также является важным направлением современной химии.

Научная новизна работы состоит в применении методов QSPR-моделирования для прогнозирования свойств как сенсорных систем, так и растворителей, что расширяет возможности этого подхода в области аналитической химии. Впервые было проведено количественное прогнозирование потенциометрической селективности сенсоров к карбонат-аниону на основе структурных характеристик ионофоров и параметров мембранных компонентов. Разработаны модели, позволяющие оценивать чувствительность мембранных сенсоров к ионам меди, кадмия и свинца, что позволяет направленно искать соединения с оптимальными аналитическими характеристиками. Существенным достижением работы также является адаптация QSPR-методов к моделированию физических свойств глубоких эвтектических растворителей, что открывает перспективы предсказательного проектирования таких систем в зависимости от их состава.

Достоверность полученных результатов подтверждена использованием современных методов регрессионного анализа, включая PLS-моделирование, кросс-

валидацию и перестановочные тесты. Для оценки адекватности предложенных моделей применены статистические критерии, позволяющие выявить их прогностическую способность и границы применимости. Спрогнозированные и экспериментальные данные в большинстве случаев согласуются между собой, а выявленные расхождения объяснены с позиций химической природы исследуемых систем. Таким образом, применённые методы обработки данных обеспечивают высокую надёжность сделанных выводов.

Практическая значимость работы связана с возможностью использования разработанных моделей для направленного поиска новых ионофоров с заданными аналитическими характеристиками, оптимизации состава сенсорных мембран и разработки новых растворителей систем с контролируемыми свойствами. Результаты исследования могут быть полезны для специалистов в области сенсорного анализа, химии материалов и экологической аналитики. Полученные QSPR-модели позволяют прогнозировать ключевые свойства сенсорных материалов и растворителей без необходимости синтеза и экспериментального тестирования всех возможных соединений, что существенно ускоряет процесс разработки новых систем.

Работа имеет чёткую структуру и включает введение, четыре главы, заключение, список литературы и приложения. Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи исследования, а также обозначены основные направления работы. Первая глава представляет собой литературный обзор, в котором рассматриваются существующие методы QSPR-моделирования, их применение в аналитической химии и материаловедении, а также обсуждаются перспективы использования этих методов для прогнозирования свойств сенсорных мембран и растворителей. Вторая глава посвящена разработке моделей прогнозирования селективности карбонатных ионофорных сенсоров, включая анализ структурных факторов, влияющих на селективность. Третья глава рассматривает применение QSPR-моделирования для оценки чувствительности мембранных сенсоров к катионам тяжёлых металлов и выявление ключевых структурных дескрипторов, определяющих аналитические характеристики сенсоров. Четвёртая глава содержит результаты моделирования физико-химических свойств глубоких эвтектических растворителей и обсуждение факторов, влияющих на их вязкость, плотность и электропроводность. В заключении сформулированы основные выводы и намечены перспективы дальнейших исследований.

Работа Владимировой Н.И. представляет собой тщательно выполненное исследование, результаты которого подтверждены статистическими методами и экспериментальными данными.

Замечания и рекомендации по диссертации:

1. Каковы границы применимости разработанных QSPR-моделей с точки зрения количества соединений, для которых доступны экспериментальные данные, а также их структурной схожести? В обсуждении результатов стоило обсудить данные границы применимости.
2. Какие методы оптимизации регрессионных моделей применялись, кроме отбора латентных переменных в PLS? Оценивалась ли возможность использования других критериев для выбора переменных?
3. Какой из трёх экспериментов оказался наиболее успешным с точки зрения практического применения?

Вышеуказанные замечания, однако, не искажают сущности изложенных в диссертации результатов, положений и выводов, не снижают общую положительную оценку научного уровня работы и носят скорее рекомендательный характер. Диссертационная работа Владимировой Надежды Игоревны представляет собой оригинальное исследование, посвящённое применению методов QSPR-моделирования для прогнозирования свойств сенсорных материалов и растворителей. Работа характеризуется высокой степенью новизны, а её результаты обладают значительным теоретическим и практическим значением. Разработанные QSPR-модели демонстрируют хорошую прогностическую способность и могут быть использованы для направленного поиска новых ионофоров, оптимизации состава мембранных сенсоров и проектирования глубоких эвтектических растворителей с контролируемыми свойствами.

Диссертация Владимировой Надежды Игоревны «Подходы QSPR в аналитической химии: *in silico* прогнозирование свойств ионоселективных электродов и глубоких эвтектических растворителей» соответствует всем требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 г. № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Владимирова Надежда Игоревна заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.2 – Аналитическая химия.

Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Член диссертационного совета,
доктор хим. наук,
доцент кафедры лазерной химии
и лазерного материаловедения
Института Химии
Санкт-Петербургского государственного университета

Мерещенко Андрей Сергеевич



03.03.2025