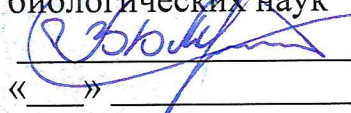


УТВЕРЖДАЮ»

Руководитель Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», доктор биологических наук


В.Б. Мартыненко
«__» _____ 2023 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Ахметьяновой Альбины Ильшатовны на тему «Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений» представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Актуальность темы исследования

Диссертационная работа Ахметьяновой Альбины Ильшатовны посвящена расчету теплового эффекта реакции и стандартной энтальпии образования вещества на основе разработки теоретико-графового подхода моделирования гомодесмотических реакций (ГДР). Метод гомодесмотических реакций заключается в разложении исходного соединения на внутренние термохимические группы. Чтобы рассчитать тепловой эффект какой-либо реакции, требуется знать энтальпии образования всех участвующих веществ. Решение вопросов разработки процессов химической технологии возможно лишь при наличии надежной информации по физико-химическим и термодинамическим свойствам химических соединений. Накоплен значительный массив этих данных. Зачастую экспериментальные данные из разных источников имеют разные значения. Кроме того, доступ к экспериментальным данным по некоторым соединениям затруднен, чрезмерно дорог, или даже невозможен. Эти проблемы привели к разработке концептуальной основы для оценки химической структуры соединения.

Оценка структуры и содержания работы

Диссертация имеет объем 176 страниц. Состоит из введения, четырех глав, списка литературы из 157 наименований, 46 рисунков и 22 таблиц.

Введение диссертации содержит обоснование актуальности, формулировки цели и задач исследования, информацию о научной новизне, практической значимости результатов, а также выносимых на защиту положений.

В первой главе исследования представлен обзор литературы, где рассматриваются изодесмотические и гомодесмотические реакции. Проведена оценка существующих математических подходов и методов, позволяющих эффективно решать задачи, связанные с расчетом термодинамических свойств химических соединений. Отдельное внимание уделено современному состоянию в области применения изо- и гомодесмотического подходов, для определения стандартной энтальпии образования органических соединений.

Во второй главе приведен разработанный автором алгоритм конструирования гомодесмотических реакций для ациклических органических соединений. Проведены вычислительные эксперименты для определения стандартной энтальпии образования молекул бутанамида, бутанола и 3-метилпентана.

В третьей главе разобран и описан алгоритм конструирования гомодесмотических реакций для циклических органических соединений. Проведен вычислительный эксперимент расчета стандартной энтальпии образования для циклических молекул: оксетана, 1,4-диоксана, пирролидина, 3-метилциклопентана, 1-метилциклопентана, 4-метилциклопентана, транс-1,3-диметилциклобутана и цис-1,3-диметилциклобутана.

В четвертой главе рассмотрен разработанный математический метод определения базиса гомодесмотических реакций органических соединений. Разработано программное обеспечение, включающее в себя компьютерную программу и базу данных, реализующее предложенный метод. Проведенный

сравнительный анализ примененных квантово-химических методов расчета стандартной энтальпии образования органических соединений позволил выявить, что ациклические соединения малочувствительны к уровню сложности квантово-химических приближений. Создана база данных, необходимая для расчета структуры и состава, а также энергетических свойств химического соединения, хранится в реляционной базе данных. Рассчитаны стандартные энтальпии образования соединений, разобранных во второй и третьей главе, а также всех реперных структур с помощью композитных методов G3 и G4, что позволило вычислить тепловые эффекты всех ГДР.

В заключении приведены основные результаты и выводы по проделанной работе.

Область исследования диссертационной работы соответствует пунктам паспорта научной специальности 1.4.4. Физическая химия: п.10 «Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства»; п.11 «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении».

Оформление диссертации соответствует ГОСТ Р 7.0.11-2011. Автореферат диссертации выполнен с соблюдением установленных требований, полностью отражает ее содержание, полученные в ней практические и теоретические результаты и выводы.

К значимым достижениям, составляющим **научную новизну работы**, можно отнести следующие:

1. Автором впервые применена теоретико-графовая интерпретация органических соединений, как основа для создания алгоритма конструирования базиса участников гомодесмотических реакций.

2. Главными преимуществами гомодесмотического подхода является повышение достоверности прогноза и возможность критического анализа и отсеивания ненадежных экспериментальных значений энтальпии образования реперных соединений.

3. Применение аппарата теории графов позволяет автоматизировать процедуру выделения базиса ГДР, что важно для последующего физико-химического анализа задач молекулярной энергетики органических соединений. В частности, представленный метод может быть применен для расчетов энтальпий образования ациклических и циклических органических соединений, энергий напряжения циклов, разделения энергий невалентных взаимодействий различной природы, энтальпий образования алкильных свободных радикалов и т.д.

Степень достоверности результатов исследования.

Достоверность научных положений, результатов и выводов подтверждается корректной постановкой задач, выбором теоретически обоснованных методов исследования и удовлетворительным согласованием результатов вычислительных испытаний с результатами лабораторных и производственных экспериментов.

Основные результаты диссертации опубликованы в 43 научных публикациях, в том числе в 13 научных статьях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Российской Федерации, ведущих зарубежных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, а также в журнале, входящем в РИНЦ. У соискателя также имеется 5

свидетельств о регистрации государственной регистрации программ для ЭВМ и баз данных.

Замечания по диссертационной работе:

1. Во второй и третьей главах не указаны погрешности экспериментальных данных, которые бы позволили оценить точность расчетных результатов, полученных с помощью квантово-химических методов G3 и G4 в гомодесмотических реакциях.

2. Неясно, что подразумевается в работе под термином «простой и сложный атом».

3. Ошибочное использование терминологии на с. 95 диссертации. SQL – это не СУБД, а язык структурированных запросов, который используется в СУБД. Поэтому остается неясным в какой из СУБД была реализована база данных базисов гомодесмотических реакций. Также в работе не указано на каком языке программирования и в какой среде была разработана авторами программа конструирования базиса ГДР.

4. На с. 55-58 диссертации приводится ручной расчет теплового эффекта ГДР со всеми арифметическими операциями, что является излишним.

5. В тексте диссертации встречаются орфографические и синтаксические ошибки, а также небрежности в оформлении:

- с. 46 предложение не закончено;

- одинаковый абзац об описании топологии молекул повторяется на с. 37, с. 49;

- таблица 3.5 на стр. 61 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 2 на стр. 146;

- аналогично, таблица 3.7 на стр. 66 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 3 на стр. 151;

- аналогично, таблица 3.9 на стр. 71 полностью повторяется с таблицей 2.15 (неверная нумерация) Приложения 4 на стр. 158;

- аналогично, таблица 3.11 на стр. 75 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 5 на стр. 164;

- аналогично, таблица 3.13 на стр. 78 полностью повторяется с таблицей 1 Приложения 6 на стр. 169.

6. Работа была бы более информативной, если бы экспериментальные и вычислительные данные были представлены в виде таблиц для большего количества органических соединений.

Замечания, высказанные, не имеют критического значения и не оказывают существенного влияния на общую положительную оценку работы.

Заключение

Представленная диссертация является завершенной работой, которая выполнена на актуальную тему. Полученные результаты являются научно и практически значимыми для исследования термодинамических свойств органических соединений. Результаты исследования стимулируют дальнейшие исследования в данной области. Материал диссертации ясно изложен, результаты представлены четко и иллюстрированы информативными рисунками. Автореферат диссертации полностью отражает содержание и основные положения диссертации.

Диссертационная работа Ахметьяновой Альбины Ильшатовны «Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений» отвечает требованиям п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Автор представленной работы Ахметьянова Альбина Ильшатовна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Отзыв подготовлен д.ф.-м.н., доцентом, старшим научным сотрудником лаборатории математической химии Колединой К.Ф.

Диссертация и отзыв на нее обсуждались на совместном заседании лаборатории математической химии и лаборатории химии высоких энергий и катализа (Протокол № 1 от 17.10.2023 г.).

Доктор физико-математических наук, по специальности 02.00.04 – Физическая химия, доцент, старший научный сотрудник лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук»

Коледина
Камила
Феликсовна

Даю согласие на обработку персональных данных.

Председательствующий заседания:

Кандидат физико-математических наук, по специальности 02.00.04 – Физическая химия, старший научный сотрудник лаборатории химии высоких энергий и катализа, заместитель директора по научной работе Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук»

Галимов Дим
Иршатович

Даю согласие на обработку персональных данных.

Адрес организации: 450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект Октября, 141.

Рабочий телефон +7(347)284-27-50;

Адрес электронной почты: ink@anrb.ru

Подпись
ЗАВЕРЯЮ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ИНК
К. Х. Н. КИНЗЯБАЕВА 3.С.



Подпись
ЗАВЕРЯЮ
УЧЁНЫЙ
К. Х. Н.

ИНК УФИМРАН
К. Х. Н. КИНЗЯБАЕВА 3.С.

