

Отзыв на автореферат диссертации Абраменко Наталии Борисовны «ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОКСИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ГИДРОБИОНТАХ», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Однако следующие замечания не отражаются на результатах и выводах диссертации.

Диссертационная работа Абраменко Н.Б. посвящена актуальному направлению современных исследований – разработке математических моделей для прогнозирования токсического действия наночастиц на живые организмы. Важнейшей особенностью представленной работы является использование современных методов машинного обучения для разработки таких моделей в рамках метода QSAR («количественные соотношения структура-активность»). QSAR – это подход, основанный на построении корреляций между структурой химических соединений и их биологической активностью. Важная задача QSAR заключается в идентификации и количественном выражении структурных параметров или физико-химических свойств молекул, влияющих на биологическую активность. Поиск количественных соотношений структура-активность основан на применении методов математической статистики и машинного обучения для построения моделей, позволяющих по описанию структур химических соединений предсказывать их свойства (физические, химические, биологическую активность).

Особенно интересна возможность применения методов QSAR к нанообъектам, рассмотренная автором с учетом специфики наночастиц и их физико-химических характеристик. Для этого автором учитываются различные характеристики наночастиц как факторы, влияющие на их токсическое действие на живые организмы.

Полученные результаты имеют большое практическое значение и представляют основание для дальнейших исследований в области Nano-QSAR. Немаловажным аспектом является также и то, что полученные модели были опробованы на результатах проведенных экспериментальных исследований.

Из недочетов работы, о которых можно судить по автореферату, можно выделить следующие вопросы и замечания:

1. Из содержания автореферата неясно, какие именно дескрипторы использовались для построения моделей, и не хватает их интерпретации.

2. Предпочтительнее использование общепринятых терминов в области статистического обучения, таких, например, как параметр перекрестного контроля q^2 . Более принят термин ассоциативные нейронные сети, а не связанные нейронные сети.

Однако сделанные замечания не отражаются на результатах и выводах диссертационной работы, которая по объему, актуальности и высокому уровню выполненного исследования, научной и практической значимости отвечает требованиям ВАК, включая п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 в редакции от 21.04.2016 г.). Ее автор Абраменко Наталия Борисовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Палюлин Владимир Александрович

Зав. лабораторией медицинской химии,
ведущий научный сотрудник
Химического факультета МГУ имени
М.В.Ломоносова,
кандидат химических наук,
уч.звание – старший научный сотрудник

119991 Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 3,
Химический факультет МГУ имени
М.В.Ломоносова

Телефон: 8-495-9393969
e-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

31 марта 2017 г.

