

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ
на выпускную квалификационную работу студентки 2 курса
магистратуры Института химии СПбГУ
Мартынко Екатерины Андреевны
«QSPR моделирование для прогнозирования аналитических
характеристик полимерных мембранных химических сенсоров».

ВКР Мартынко Е.А. посвящена исследованию возможности применения подходов QSPR (количественное моделирование зависимости структура-свойства) в качестве инструмента для прогнозирования селективности потенциометрических сенсоров на основе полимерных пластифицированных мембран с органическими лигандами. В работе изучен широкий спектр лигандов, проявляющих в паре магний-кальций различную селективность. Результаты исследования опубликованы в журнале *Electroanalysis* (IF = 2.691).

Значительный интерес представляют полученные магистранткой математические модели, которые связывают структуры лигандов, формализованные в виде набора числовых дескрипторов с селективностью соответствующих сенсоров. Идея прогностического моделирования структур лигандов для использования в химических сенсорах, разумеется, не нова, однако, предпринимавшиеся до настоящего времени попытки были связаны с прогнозированием констант устойчивости комплексов лигандов с целевыми ионами, в основном, с помощью аппарата квантовой химии. Несмотря на то, что величины этих констант, безусловно, важны для создания сенсоров, они зачастую не дают возможность спрогнозировать конкретные численные величины отдельных аналитических характеристик сенсоров, поскольку на эти величины влияет множество других факторов, связанных с составом мембраны. Прямое численное прогнозирование величин коэффициентов селективности выполнено впервые в работе Екатерины Андреевны.

Магистрантке удалось обеспечить качественное проведение сложных и трудоемких расчетов. Екатерина Андреевна смогла освоить довольно сложный математический аппарат, необходимый для проведения QSPR

моделирования, принимала самое активное и непосредственное участие в планировании работы и обсуждении ее результатов. Результаты работы неоднократно представлялись Екатериной Андреевной на профильных конференциях и получили высокую оценку коллег. На мой взгляд, представленная выпускная квалификационная работа, безусловно, заслуживает отличной оценки.

Научный руководитель



профессор кафедры

аналитической химии., д. х. н. Кирсанов Д. О.