

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Осипенко Сергея Владимировича
«Прогнозирование хромато-масс-спектрометрических характеристик химических соединений в нецелевом анализе с применением методов машинного обучения»

1. Ф.И.О.: Буряк Алексей Константинович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: Член-корреспондент РАН, профессор

Научная(ые) специальность(и): 1.4.2 – Аналитическая химия

Должность: директор

Место работы: ФГБУ Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук

Адрес места работы: 119071, Москва, Ленинский проспект, 31 корп. 4.

Тел.: +7 (495) 955-44-87

E-mail: dir@phche.ac.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.2 — Аналитическая химия за последние 5 лет:

1. Grinevich O., Khesina Z., **Buryak A.** Abnormal retention of s-triazine herbicides on porous graphitic carbon // *Reviews in Analytical Chemistry*, 2022. – V. 41. – N. 1. – P. 1-9.
2. Fedorova, E. S., Matyushin, D. D., Plyushchenko, I. V., Stavrianidi, A. N., **Buryak, A. K.** Deep learning for retention time prediction in reversed-phase liquid chromatography. // *Journal of Chromatography A*, 2021, - V.1664. –P. 462792.
3. Sholokhova A. Y., Borovikova S. A., **Buryak A. K.** 1-Butyl-3-methylimidazolium pentafluorophenyl trifluoroborate as new type ionic liquids for MALDI analysis small molecules // *International Journal of Mass Spectrometry*, 2021. – V. 469. – P. 116666.
4. Samukhina, Y. V., Matyushin, D. D., Grinevich, O. I., **Buryak, A. K.** A Deep Convolutional Neural Network for Prediction of Peptide Collision Cross Sections in Ion Mobility Spectrometry // *Biomolecules*, 2021, -V. 11. – N.12. – P. 1904.
5. Matyushin D. D., Sholokhova A. Y., **Buryak A. K.** Deep Learning Based Prediction of Gas Chromatographic Retention Indices for a Wide Variety of Polar and Mid-Polar Liquid Stationary Phases // *International journal of molecular sciences*, 2021. – V. 22. – N. 17. – P. 9194.

2. Ф.И.О.: Григорьев Андрей Михайлович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: нет

Научная(ые) специальность(и): 1.4.2. – Аналитическая химия

Должность: старший научный сотрудник (14 научно-исследовательский отдел 1 научно-исследовательского испытательного управления).

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение «27 Научный центр» Министерства обороны Российской Федерации.

Адрес места работы: 11024, г.Москва, проезд Энтузиастов, д.19, стр.20.

Тел.: +7 (495) 693-44-44

E-mail: 27nc_1@mil.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.2 — Аналитическая химия за последние 5 лет:

1. **Grigoryev A.**, Kavanagh P., Labutin A., Pechnikov A., Dowling G., Shevyrin V., Krupina N. Tentative identification of the metabolites of (1-(cyclohexylmethyl)-1H-indol-3-yl)-(2, 2, 3, 3-

- tetramethylcyclopropyl) methanone, and the product of its thermal degradation, by in vitro and in vivo methods // Drug Testing and Analysis. – 2019. – Т. 11, № 9. – С. 1387-1402.
2. **Grigoryev A.**, Kavanagh P., Dowling G., Rodin I. Tentative identification of Etazene (etodesnitazene) metabolites in rat serum and urine by gas chromatography–mass spectrometry and accurate mass liquid chromatography–mass spectrometry // Journal of Analytical Toxicology. – 2022. – Т. 46, № 9. – С. 1032-1037.
 3. Kavanagh P., Gofenberg M., Shevyrin V., Dvorskaya O., Dowling G., **Grigoryev A.** Tentative identification of the phase I and II metabolites of two synthetic cathinones, MDPHP and α -PBP, in human urine // Drug Testing and Analysis. – 2020. – Т. 12, № 10. – С. 1442-1451.
 4. Kavanagh P., Pechnikov A., Nikolaev I., Dowling G., Kolosova M., **Grigoryev A.** Detection of ADB-BUTINACA Metabolites in Human Urine, Blood, Kidney and Liver // Journal of Analytical Toxicology. – 2022. – Т. 46, № 6. – С. 641-650.
 5. Zaikina O. L., Shilov V. V., Lodyagin A. N., Glushkov S. I., **Grigoryev A. M.** Determination of the structures of free and glucuronidated metabolites of α -pyrrolidinovalerophenone in human urine by liquid chromatography–mass spectrometry with accurate mass measurement // Journal of Analytical Chemistry. – 2019. – Т. 74. – С. 489-504.

3. Ф.И.О.: Мильман Борис Львович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: нет

Научная(ые) специальность(и): 1.4.2 – Аналитическая химия

Должность: ведущий научный сотрудник (лаборатория токсикологической химии органических соединений химико-аналитического отдела)

Место работы: «ФГБУ Научно-клинический центр токсикологии имени академика С.Н. Голикова Федерального медико-биологического агентства» (ФГБУ НКЦТ им. С.Н. Голикова ФМБА России)

Адрес места работы: 192019, Санкт-Петербург, ул. Бехтерева, д. 1

Тел.: +7 (812) 365-06-80

E-mail: institute@toxicology.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.2 — Аналитическая химия за последние 5 лет:

1. **Milman BL**, Ostrovidova EV, Zhurkovich IK. Big Free-Access Chemical Databases in Non-Target Mass Spectrometry Analysis // Journal of Analytical Chemistry, 2021 – V. 76 – N.13 – P. 1477-1484.
2. **Milman BL**, Zhurkovich IK. Statistics of the Popularity of Chemical Compounds in Relation to the Non-Target Analysis // Molecules, 2021 – V. 26 – N.8 –P. 2394 -2405.
3. **Мильман Б.Л.**, Островидова Е.В., Журкович И.К. Большие химические базы данных свободного доступа в нецелевом масс-спектрометрическом анализе // Масс-спектрометрия, 2020 - Т. 17. - № 2. - С. 87-94.
4. **Milman BL**, Zhurkovich IK. Big data in modern chemical analysis // Journal of Analytical Chemistry, 2020 – V.75 – N. 4 – P. 443-452.
5. **Milman BL**, Solov'eva AV, Lugovkina NV, Zhurkovich IK. Features of Tryptic Peptides Providing The Detection and Identification by MALDI Mass Spectrometry // Journal of Analytical Chemistry, 2019 – V.74 – N.13 – P. 1286-1295.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.5,

И.А. Ананьева

Подпись, печать