

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Осипенко Сергея Владимировича
«Прогнозирование хромато-масс-спектрометрических характеристик химических соединений в нецелевом анализе с применением методов машинного обучения»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.2 Аналитическая химия

Диссертационная работа Осипенко С.В. посвящена проблеме идентификации химических соединений по результатам масс-спектрометрического анализа. Проблема является актуальной, как в нецелевых исследованиях сложных образцов, так и в прикладных задачах, например, при идентификации метаболитов лекарственных средств. Основная цель работы заключалась в разработке методов прогнозирования времен удерживания в жидкостной и газовой хроматографии, рассмотрены также вопросы предсказания масс-спектров электронной ионизации с помощью машинного обучения. Автором продемонстрирована высокая точность прогнозов при моделировании времен удерживания с использованием библиотеки METLIN, предложены способы использования предсказаний при изменении условий хроматографического разделения. Вычислительная часть работы проведена с использованием общепринятых в машинном обучении подходов к оценке результатов, что подкрепляет заявленные выводы, касающиеся характеристик разработанных моделей. В дополнение к основной части работы, проведенной с использованием вычислительных методов автором изучена селективность изотопного обмена $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$. Показан потенциал этой реакции в сочетании с масс-спектрометрией высокого разрешения для идентификации химических соединений. Таким образом, научная новизна работы и ее практическая значимость не вызывают сомнений.

При изучении автореферата возник несколько вопросов и замечаний:

1. Автором продемонстрировано, что, используя разработанные модели прогнозирования удерживания, возможно вдвое сократить количество рассматриваемых кандидатов при идентификации веществ с помощью хромато-масс-спектрометрии. Однако, эта оценка проводилась для нецелевого анализа с рассмотрением всех возможных изомеров. Как поведут себя разработанные подходы в более узких задачах, таких как идентификация метаболитов лекарственных средств, где требуется различать очень близкие по структуре химические соединения?
2. Масс-спектрометры высокого разрешения по-прежнему недостаточно распространены в аналитических лабораториях. Возможно ли принципиальное

использование метода изотопного обмена в сочетании с анализом на приборах с квадрупольными масс-анализаторами?

Несмотря на сделанные замечания, диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Осипенко Сергей Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2 Аналитическая химия.

Заведующий лабораторией биоаналитики

ООО «НИИ ХимРар»,

кандидат биологических наук

Корякова Анжела Григорьевна

11.03.2024

Адрес: 141401, Московская область, г. Химки, ул. Рабочая, д. 2а, к. 1, ЦВТ «ХимРар»

e-mail: ε

Тел.

Подпись Коряковой Анжелы Григорьевны заверяю:

Начальник Отдела кадров ООО «НИИ ХимРар»

Сдобнова Е.Ю.