

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 С.В. Осипенко посвящена разработке новых вычислительных методов для предсказания хроматографического удерживания и масс-спектров с помощью машинного обучения. Такие методы могут способствовать идентификации химических соединений, что несомненно является актуальной задачей в различных исследованиях. Предложен новый подход к установлению функциональных групп в составе молекулы с использованием реакции изотопного обмена $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$. Разработаны методы создания библиотек для ГХ-МС анализа. Автором проведен большой объем как теоретических, так и экспериментальных исследований, результаты которых представляют не только научную, но и практическую ценность. По итогам работы автором опубликовано 6 печатных работ в рецензируемых научных изданиях, среди которых ведущие журналы по аналитической химии (The Analyst, Journal of Chromatography A), что является дополнительным подтверждением высокого уровня выполненной работы.

Тем не менее, есть ряд замечаний:

1. Web-страницы разработанных приложений, ссылки на которые приведены в автореферате на момент составления отзыва недоступны.
2. В автореферате есть несколько грамматических ошибок и опечаток.

Вышеуказанные замечания безусловно не являются критическими, 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.

Кандидат химических наук

Смирнов Роман Сергеевич

e-mail



Тел.:

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Научный центр экспертизы средств медицинского применения» Министерства здравоохранения Российской Федерации, главный эксперт лаборатории биотехнологических препаратов испытательного центра экспертизы качества лекарственных средств.

Адрес: 123182, Россия, г. Москва, Щукинская ул., д. 6, корп. 1

Р.С. Смирнов

Подпись Смирнова Р.С. удостоверяю