

ОТЗЫВ официального оппонента

на диссертацию на соискание ученой степени

кандидата химических наук Рукосуевой Елизаветы Алексеевны

на тему: «Классификация объектов анализа по данным флуориметрии с использованием добавок флуорофоров («флуоресцентный глаз»)
по специальности 02.00.02 – «Аналитическая химия»

Использование многомерных статистических методов при анализе вещества – важное и относительно новое направление развития аналитической химии. В диссертационной работе Е.А.Рукосуевой как раз и разрабатываются варианты применения многомерных статистических методов при флуориметрическом анализе.

Работа посвящена демонстрации возможностей решения задачи отнесения исследуемых объектов к тем или иным группам классическими многомерными методами, в основном методом главных компонент, с использованием спектров флуоресценции, причем спектры флуоресценции регистрируются после внесения флуорофоров в растворы исследуемых веществ. В целом она направлена на решение актуальной задачи отнесения веществ и их смесей к той или иной группе веществ, важной, например, при проверке подлинности и выявлении фальсификатов в фармакологии.

Автор не является первооткрывателем такого подхода, но в своем обзоре литературы он сообщает только об одной группе, работавшей в данном направлении, причём с использованием трудно синтезируемых, малодоступных флуорофоров. В отличие от описанных в литературе способов в работе использованы доступные флуорофоры, причем автор рассматривал возможность применения как реальных, так и виртуальных смесей. Проведена большая экспериментальная работа по синтезу новых флуорофоров и исследованию их свойств в различных системах. Интересен реализованный автором приём повы-

шения эффективности флуорофоров, основанный на закреплении их на коллоидном носителе. Кроме того, для регистрации спектров флуоресценции автором использована цифровая фотография, что позволило сократить время анализа и, с использованием ряда встроенных функций коммерческого визуализатора, повысить качество дискриминирования образцов.

Таким образом, работа актуальна, её результаты обладают достаточной новизной. Иллюстрацией ее потенциальной практической значимости является демонстрация эффективности разработанных подходов к дифференциации объектов сложного состава — разных сортов виски, меда, смесей некоторых лекарств и т.д.. Хотя в рамках данной работы и не созданы методы идентификации реальных объектов, полученные результаты убедительно демонстрируют высокий потенциал применения для этих целей флуоресценции (в частности, с добавкой флуорофоров) в сочетании с многомерными методами обработки результатов.

Оценивая диссертацию Е.А.Рукосуевой в целом, необходимо отметить, что полученные в работе результаты вполне оригинальны. Диссертация хорошо оформлена. Она написана хорошим языком, текст сопровождается качественными рисунками. Основные результаты, полученные автором, должным образом опубликованы. Автореферат полно и аутентично передает содержание диссертации.

В то же время можно отметить некоторые недостатки.

Удивительно, но автор нигде не указал, какие именно измеряемые величины использовались при статистическом анализе. На стр. 49 указано, что «матрица данных содержала все спектры, полученные в ходе эксперимента» (?). Еще намек обнаруживается на стр. 59, где сказано об «уменьшении размерности задачи методом PCA с нескольких сотен (число регистрируемых длин волн в спектре) до двух-трех ...»). Непонятно, что такое «число длин волн в спектре». Можно предполо-

жить, что регистрировались и обрабатывались статистически интенсивности флуоресценции при разных длинах волн с каким-то шагом (например, через 1 нм), но так ли это?

2. Не обосновано использование как стандартного расстояния Махалонобиса, равного 4, что соответствует доверительной вероятности намного меньшей 0.9. Стандартная доверительная вероятность в метрологии химического анализа равна 0.95, да и то, если последствия ошибки первого рода не слишком катастрофичны.

3. Предложенный способ оценки качества дискриминации по числу пересекающихся эллипсов любопытен, но утверждение, что одно из его преимуществ — возможность обойтись без программного обеспечения (стр. 95) — явно некорректно. Строить доверительные эллипсы вручную без компьютерных программ весьма затруднительно.

4. С точки зрения разработки способов идентификации сомнительной выглядит идея повторного применения метода главных компонент после отброса части данных (разд. 3.3.2). Конечно, при этом может происходить дополнительная дискриминация для оставшихся данных, но это вряд ли может быть использовано при идентификации веществ.

Можно сделать и более мелкие замечания.

Сделанные замечания не умаляют значимости диссертационно-госследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.02 – «Аналитическая химия» (по химическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, Рукосуева Елизавета Алексеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – «Аналитическая химия».

Официальный оппонент:

доктор химических наук, профессор,

Главный научный сотрудник Лаборатории № 2

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Орде-на Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН)

ДВОРКИН Владимир Ильич

15 февраля 2021 г.

Контактные данные:

тел. +7(910)400-1429, e-mail: dvorkinvi@yandex.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация:

02.00.02 – Аналитическая химия

Адрес места работы: 119991 г. Москва, Ленинский просп. 29, ИНХС РАН, Лаб. 2, +7(495)647-59-27, доб. 334; e-mail: dvorkin@ips.ac.ru ; tips@ips.ac.ru

Подпись сотрудника ИНХС РАН

В.И.Дворкина удостоверяю.

Ученый секретарь ИНХС РАН, к.х.н.

Костина Ю.В.



Москва, 15 февраля 2021 г.