

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.102.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ИНСТИТУТА ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 14.02.2017 г., протокол № 1

О присуждении Тинькову Олегу Викторовичу, гражданину Российской
Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Количественная оценка влияния структуры на токсичность, липофильность и растворимость в воде экологически опасных органических соединений» по специальности 02.00.03 органическая химия принята к защите 13.12.2016 г., протокол № 13, диссертационным советом Д 002.102.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физиологически активных веществ Российской академии наук (ИФАВ РАН), Федеральное агентство научных организаций (ФАНО), 142432, г. Черноголовка Московской обл., Северный пр., 1, утвержден приказом Минобрнауки РФ №714/нк от 2.11.2012 г.

Соискатель Тиньков Олег Викторович, 1984 года рождения, в 2006 г. окончил Приднестровский государственный университет им. Т.Г.Шевченко (ПГУ). С 2009 по 2013 г. обучался в заочной аспирантуре ПГУ. С января 2014 г. служит в должности зам. начальника отдела экспертиз материалов, веществ и изделий Государственного учреждения Экспертно-криминалистический центр Министерства внутренних дел Приднестровской Молдавской Республики.

Диссертационная работа выполнена на кафедре химии и методики преподавания химии Естественно-географического факультета Приднестровского государственного университета им. Т.Г.Шевченко.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Кузьмин Виктор Евгеньевич, руководитель отдела молекулярной структуры и хемоинформатики Физико-химического института им. А.В. Богатского НАН Украины.

Официальные оппоненты: Клюев Михаил Васильевич, доктор химических наук, профессор кафедры органической и физической химии ФГБОУ ВО Ивановский государственный университет; Палюлин Владимир Александрович, кандидат

химических наук, ведущий научный сотрудник кафедры медицинской химии и тонкого органического синтеза Химического факультета ФГБОУ ВО Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, дали положительные отзывы на диссертацию. Ведущая организация ФГБОУ ВО Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, в положительном заключении, подготовленном старшим научным сотрудником кафедры органической химии Химического института им. А.М. Бутлерова кандидатом химических наук Маджидовым Тимуром Исмаиловичем и подписанном заведующим кафедрой доктором химических наук, профессором, член-корреспондентом РАН Антипиным Игорем Сергеевичем и кандидатом химических наук, доцентом Казымовой Мариной Александровной, указала, что диссертационная работа Тинькова О.В. «удовлетворяет всем требованиям, установленными п. 9-14 «Положения о порядке присуждении ученых степеней».

Соискатель имеет 28 опубликованных работ, из них по теме диссертации 27 научных работ в соавторстве с сотрудниками академических институтов (личный вклад соискателя 60%), общим объемом 21 печатный лист, в том числе 6 статей в научных журналах, включенных в перечень российских рецензируемых журналов для опубликования основных научных результатов диссертаций, а также 2 статьи в зарубежных высокорейтинговых научных изданиях; 14 тезисов докладов на украинских, всероссийских и международных конференциях.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. P.Polischuk, **O.Tinkov**, T.Khristova, L.Ognichenko, A.Kosinskaya, A.Varnek, V.Kuz'min. Structural and Physico-Chemical Interpretation of QSAR Models and its Comparison with Matched Molecular Pair Analysis / J. Chem. Inf. Model. 2016. Vol. 56. P. 1455–1469.
2. **O.V.Tinkov**, L.N.Ognichenko, V.E.Kuz'min, L.G.Gorb, A.P.Kosinskaya, N.N.Muratov, E.N.Muratov, F.C.Hill, J.Leszczynski. Computational Assessment of Environmental Hazards of Nitroaromatic Compounds: Influence of the Type and Position of Aromatic Ring Substituents on Toxicity / J. Struct. Chem. 2016. Vol. 27. P. 191–198.
3. **О.В.Тиньков**, Е.Н.Муратов, А.Г.Артеменко, В.Е.Кузьмин. Изучение и прогнозирование репродуктивной токсичности органических соединений различных классов на основе 2D симплексного представления молекулярной структуры / Химико-фармацевтический журнал. 2013. Том 47. № 8. С. 30–36.

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов, которые подписали:

1. Поройков В.В., докт. биол. наук, проф., зав. лаб., и Филимонов Д.А., канд. физ.-мат. наук, в.н.с. лаборатории структурно-функционального конструирования лекарств ФГБУН «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича» с замечаниями по оформлению автореферата и рекомендациями использовать дополнительные источники информации по токсичности органических соединений.

2. Соловьев В.П., докт. хим. наук, в.н.с. лаборатории новых физико-химических проблем ФГБУН Института физической химии и электрохимии им.А.Н.Фрумкина Российской академии наук, с замечаниями по оформлению автореферата.

3. Кузнецов В.В., докт. хим. наук, профессор кафедры физики Уфимского государственного авиационного технического университета, с вопросом о термине «электростатические факторы».

4. Хайруллина В.Р., докт. хим. наук, доц. кафедры физической химии и химической экологии Башкирского государственного университета с замечаниями по оформлению автореферата.

5. Васильев П.М., докт. биол. наук, с.н.с. НИИ фармакологии Волгоградского государственного медицинского университета, руководитель лаборатории молекулярного моделирования и компьютерного поиска лекарственных веществ, ст. преподаватель кафедры фармакологии ВолгГМУ, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается близостью исследовательских тематик.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан новый комплексный подход к теоретической оценки токсичности, липофильности и растворимости в воде органических соединений, позволивший выявить количественные закономерности «структура–токсичность (острая, репродуктивная)», «структура–липофильность, водная растворимость» органических веществ различных классов;

предложены эффективные модели острой токсичности для млекопитающих при различных способах введения органических токсикантов, основанные на сочетании

симплексного представления молекулярной структуры и современных методов анализа многомерных данных и машинного обучения;

доказана перспективность использования предложенных количественных зависимостей для прогнозирования токсичности, липофильности, растворимости в воде новых органических соединений, что является чрезвычайно важным при создании новых соединений с комплексом полезных свойств.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказана возможность эффективного использования 2D-симплексного представления молекулярной структуры при выявлении новых количественных закономерностей «структура–токсичность (острая, репродуктивная)», «структура–липофильность, водная растворимость»;

применительно к проблематике диссертации результативно, т.е. с получением обладающих новизной результатов, использован комплекс современных методов анализа многомерных данных и машинного обучения;

изложены относительные вклады структурных фрагментов, некоторых физико-химических характеристик (электростатических, гидрофобных и др.) в проявление острой, репродуктивной токсичности, липофильности, растворимости в воде органических соединений;

выявлены закономерности в проявлении токсичности для галогенсодержащих углеводородов, органических кислот и их производных, отдельно сложных эфиров;

определен ряд структурных фрагментов, устойчиво повышающих острую токсичность.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

создана экспертная система, позволяющая проводить предварительную селекцию потенциально опасных веществ, предсказывая острую токсичность, липофильность и растворимость в воде органических соединений. Данный программный комплекс также включает в себя информационную систему «Toxic v.1.1.5.b», содержащую данные по острой, репродуктивной токсичности, липофильности, растворимости в воде и структурам 2067 органических соединений;

представлен набор молекулярных фрагментов, введения которых нужно избегать при создании новых соединений с комплексом полезных свойств.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

результаты теоретических расчетов получены с использованием современных методов анализа многомерных данных и машинного обучения, успешно зарекомендовавших себя при выявлении закономерностей «структура–свойство»;

теория исследования основывается на общих закономерностях органической химии, токсикологии, экологии, новые результаты согласуются с известными;

идея базируется на анализе практики и обобщении сведений по исследованию количественных закономерностей «структура–токсичность», «структура–липофильность, водная растворимость» экологически опасных соединений;

установлено качественное и количественное совпадение полученных результатов с литературными данными, современными программными комплексами, функционирующими на основе QSAR/QSPR методов.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в постановке проблемы и целей исследования, в определении путей и методов их достижения; автором выполнены моделирование структур и свойств биологически активных веществ; интерпретация и обобщение полученных данных, а также осуществлены подготовка статей к публикации и апробация результатов исследования.

На заседании 14.02.2017 г. диссертационный совет принял решение присудить Тинькову Олегу Викторовичу ученую степень кандидата химических наук. При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 8 докторов наук по специальности 02.00.03 органическая химия, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за 15, против 0, недействительных бюллетеней 1.

Председатель

диссертационного совета

Ученый секретарь

диссертационного совета

14.02.2017 г.

Подписи Н.С. Зефирова и С.В. Афанасьевой заверяю.



Зефиров Николай Серафимович

Афанасьева Светлана Васильевна

ЗАВ. КАНЦЕЛЯРИЕЙ

ТЕРЕНТЬЕВА И.Л.