

## ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Шадриной Г.Р. «Анализ связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности**

### **1.4.3. Органическая химия**

Диссертация посвящена актуальной задаче прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров на основе их химического строения. Автор обоснованно использует методы машинного обучения (в итоге выбран метод случайного леса) и молекулярные отпечатки Моргана, что позволяет учитывать тонкие структурные нюансы органических гомополимеров на уровне структурного звена (например, положение заместителей в ароматическом кольце), неразличимые в классических прогностических подходах.

В диссертации предложена модель, параметры которой хорошо интерпретируются в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров: А связан с молекулярным объемом и гибкостью цепи, В – с совокупностью межмолекулярных взаимодействий, С – с долей свободного объема. Установлены статистически значимые корреляции параметра В с электронными свойствами повторяющихся звеньев органических гомополимеров (поляризуемость, дипольный момент, потенциал ионизации и др.). Все это научная новизна работы.

Теоретическая значимость работы – возможность анализа результатов моделирования в рамках теории химического строения и фундаментальных теорий стеклования. Практическая значимость – разработанное программное обеспечение может использоваться в качестве прогностического модуля для технологического моделирования. Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений: корректно разделены выборки, проведена верификация модели. Результаты работы представлены в 2 статьях в рецензируемых журналах и апробированы с докладами на ряде конференций.

Замечание: не обсуждается влияние молекулярной массы и полидисперсности органических гомополимеров на температуру стеклования. Учет этих характеристик, как отмечено в заключении, является

перспективами развития темы исследования, однако следовало кратко оценить их возможное влияние на точность текущей модели.

Работа соответствует всем требованиям, предъявляемым «Положением о присуждении ученых степеней» (утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. в действующей редакции) к кандидатским диссертациям. Шадрина Г.Р. достойна присвоения ей искомой степени.

Прочухан Константин Юрьевич

доктор технических наук (специальность 05.17.04 — технология органических веществ)

заместитель генерального директора

по технологическому развитию ООО «Ойл ресурс»

123112, г. Москва, Пресненская наб. 12, Башня «Федерация», 60 этаж

Телефон: 8 800 600 29 44

E-mail: [mail@oilresource.ru](mailto:mail@oilresource.ru)

*Я, Прочухан Константин Юрьевич, даю согласие на обработку персональных данных.*

Дата *25.05.2026*

К.Ю. Прочухан

Подпись Прочухан К.Ю. заверяю



Вход. № *05-8964*  
« *28* » *05* *2026* г.  
подпись *Алексеева И.Р.*