

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Шадринной Гузель Руслановны «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

Диссертационная работа Шадринной Г.Р. посвящена актуальной проблеме органической химии в области установления закономерностей «структура-свойство» – прогнозированию температуры стеклования органических гомополимеров на основе их химического строения с применением методов машинного обучения. Актуальность темы не вызывает сомнений: полимеры являются ключевыми материалами современной промышленности, а температура стеклования определяет границы их эксплуатации. Существующие эмпирические и инкрементальные подходы часто недостаточно точны или требуют трудоемких расчетов, а модели машинного обучения, предложенные ранее, носили методический характер без глубокой физико-химической интерпретации. Диссертант восполняет этот пробел, создавая интерпретируемую модель, результаты которой анализируются в рамках теорий стеклования и химического строения.

Основная научная новизна диссертации заключается в том, что впервые на основе комбинации молекулярных отпечатков Моргана и метода случайного леса построена интерпретируемая модель, прогнозирующая температуру стеклования органических гомополимеров через параметры, аналогичные инкрементальным (A, B, C), и установлены количественные корреляции этих параметров с квантово-химическими характеристиками повторяющихся звеньев, что позволило в рамках теорий стеклования и химического строения органических соединений обосновать физический смысл параметров как меры гибкости макромолекул (A), совокупности межмолекулярных взаимодействий (B) и доли свободного объема (C).

Теоретическая значимость работы состоит в том, что построенная модель не является «черным ящиком»: ее параметры имеют четкий физический смысл и согласуются с термодинамическими и кинетическими теориями стеклования (Волькенштейна-Птицына, Готлиба-Птицына, теорией свободного объема, теорией межмолекулярных связей Журкова).

Практическая значимость подтверждена разработкой программного обеспечения для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров и возможностью использования модели в качестве прогностического модуля при технологическом моделировании процессов синтеза полимеров.

Достоверность результатов обеспечивается использованием репрезентативной базы данных (822 полимера после фильтрации), корректным применением методов машинного обучения, верификацией на независимых тестовых выборках и согласием с фундаментальными теориями.

Автореферат логично структурирован, содержит все необходимые разделы, результаты проиллюстрированы таблицами и рисунками. Автореферат полностью отражает содержание публикаций – основные результаты опубликованы в 2 статьях в рецензируемых журналах и апробированы на всероссийских и международных конференциях.

Замечания по существу работы (впрочем, не снижающие общей позитивной оценки):

1. На стр. 12 автореферата указано, что из исходной базы данных (1050 полимеров) исключены 228 органических гомополимеров из-за неоднозначной интерпретации структуры в формате SMARTS. Однако не обсуждается, насколько репрезентативна оставшаяся

выборка для всего класса органических гомополимеров и не возникает ли смещения в сторону легко кодируемых структур. Желательно было бы привести сравнительный анализ распределений температур стеклования органических гомополимеров в исключенной и оставшейся частях.

2. В работе убедительно показано, что модель хорошо различает изомеры замещенных полистиролов. Однако проверка на полимерах с более сложными функциональными группами (например, сложноэфирными, амидными, содержащими водородные связи) или на гетероцепных полимерах (полиэфиры, полиамиды) в диссертации не представлена. Хотя это и может быть задачами для дальнейших исследований, следовало бы кратко охарактеризовать область применимости модели по химическому разнообразию.

Указанные замечания не ставят под сомнение научную и практическую ценность диссертации. Работа соответствует требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утв. Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Шадрин Гузель Руслановна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Я, Екатерина Владимировна Скорб, выражаю согласие на обработку персональных данных, включение их в аттестационное дело соискателя, размещение отзыва на сайте.

Директор мегафакультета наук о жизни,  
директор, профессор научно-образовательного  
центра инфохимии  
Федерального государственного автономного  
образовательного учреждения  
«Национальный исследовательский  
университет ИТМО», д.х.н. (1.4.4. Физическая химия)

Скорб Екатерина  
Владимировна

Полное название организации: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»  
Почтовый адрес: 197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49, лит. А.,  
<https://itmo.ru/>  
тел: +7(999)2103977  
Электронная почта: [skorb@itmo.ru](mailto:skorb@itmo.ru)  
Дата составления :20.05.2026 г.

Подпись  
удостоверяю  
Менеджер ОПС  
Виноградова А.Д.



Вход. №05-8963  
«28» 05 2026 г.  
подпись