

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

Автореферат диссертации Шадриной Г.Р. отражает содержание работы, посвященной актуальной проблеме органической химии – установлению количественных закономерностей между химическим строением повторяющихся звеньев органических гомополимеров и их температурой стеклования. Автором предложен оригинальный гибридный подход, сочетающий инкрементальный метод А.А. Аскадского, машинное обучение (метод случайного леса) и квантово-химические расчеты. Полученные результаты имеют теоретическую значимость для развития теории химического строения и практическую ценность для прогнозирования свойств новых полимерных органических соединений.

Научная новизна, представленная в автореферате, несомненна: впервые построена интерпретируемая модель машинного обучения, прогнозирующая температуру стеклования органических гомополимеров через параметры А, В, С с последующим установлением их корреляции с молекулярным объемом и электронными свойствами повторяющихся звеньев полимеров. Особо следует отметить демонстрацию влияния положения заместителя в ароматическом кольце (коэффициент детерминации повышается с 0.12 до 0.81), что является прямым вкладом в теорию химического строения органических соединений.

Достоверность результатов обеспечена репрезентативной выборкой (822 гомополимера), корректным применением методов машинного обучения с кросс-валидацией, 50-кратным повторением вычислительных экспериментов и согласием полученных корреляций с известными теориями стеклования.

Замечания:

1. В автореферате не указано, какой радиус использовался для генерации молекулярных отпечатков Моргана. Проводилось ли варьирование радиуса? Если да, то как варьирование радиуса влияет на точность прогнозирования параметров А, В, С?

2. В работе делается вывод о том, что параметр С прямо пропорционален доле свободного объема. Этот вывод основан на гомологическом ряду полиметакрилатов. Прямые расчеты свободного объема (например, методами молекулярной динамики) отсутствуют, что оставляет интерпретацию параметра С на уровне гипотезы.

Замечания не снижают общей положительной оценки работы. Диссертация соответствует паспорту специальности 1.4.3 (п. 4 и 7) и требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней (утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г.), а ее автор, Шадрина Гузель Руслановна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Доктор химических наук (специальность 1.4.4. Физическая химия), Директор Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, главный научный сотрудник лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН

Сабиров Денис Шамилович

Дата « 05 » 06 2026 г.

Даю согласие на обработку персональных данных.



ПОДПИСЬ
ЗАВЕРЯЮЩАЯ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ИНК УФИЦ РАН

К.Х.Н. ПАВЛОВА И.Н.



Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН). Почтовый адрес: 450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект Октября, 141. Тел.: +7 (347) 284-27-50. E-mail: ink@anrb.ru, sabirovdsh@mail.ru.

Вход. № 05-9024
« 10 » 06 2026 г.