

Отзыв на автореферат диссертации Шадриной Гузель Руслановны

«Анализ связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров», представленной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия

Диссертационная работа Шадриной Г.Р. посвящена решению актуальной задачи установления количественной связи между химическим строением повторяющихся звеньев органических гомополимеров и их температурой стеклования с использованием методов машинного обучения. Актуальность темы обусловлена необходимостью ускоренного прогнозирования свойств полимеров для направленного синтеза материалов с заданными эксплуатационными характеристиками, а также недостаточной интерпретируемостью существующих QSPR-моделей в рамках фундаментальных теорий стеклования и химического строения. Также сложность явления стеклования, зависимость этой фундаментальной характеристики от большого числа факторов, в том числе и от метода измерения, подчеркивает необходимость прогнозирования этой величины.

Теоретическая значимость исследования заключается в развитии методологии моделирования «структура – свойство» для полимеров. Автором впервые предложен гибридный подход, сочетающий инкрементальный метод А.А. Аскадского и алгоритм случайного леса, что позволило не только прогнозировать температуру стеклования, но и интерпретировать полученные параметры (А, В, С) в терминах гибкости макромолекул, межмолекулярных взаимодействий и доли свободного объема. Особенно ценно сопоставление и обоснование результатов с существующими теориями стеклования. Установлены корреляции между электронными свойствами повторяющихся звеньев (рассчитанными методом DFT) и параметром В, что подтверждает физическую обоснованность модели.

Практическая ценность диссертационного исследования подтверждается разработкой программного обеспечения для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров. Модель, показавшая коэффициент детерминации R^2 до 0.90 на тестовой выборке, может быть использована в качестве прогностического модуля при технологическом моделировании промышленных процессов синтеза полимеров, позволяя существенно сократить временные и финансовые затраты на экспериментальный подбор составов. Существующие модели характеризуются коэффициентом детерминации R^2 не более 0.85.

Замечания по автореферату.

1. Из автореферата не вполне ясно, каким образом осуществлялся учёт молекулярно-массовых характеристик полимеров (степени полимеризации, полидисперсности) и их влияния на температуру стеклования. Из текста следует, что моделирование опирается в первую очередь на строение повторяющегося звена, однако для гомополимеров одного типа, но с разной молекулярной массой температура стеклования может заметно различаться (особенно в области низких молекулярных масс).
2. В автореферате указано, что из исходной базы данных (1050 полимеров) были исключены 228 структур из-за неоднозначной интерпретации в формате SMARTS (например, атомы серы с переменной валентностью). Однако не поясняется, как это исключение могло повлиять на обобщаемость модели и не привело ли к смещению выборки в сторону более «простых» структур.
3. Используемые экспериментальные данные были взяты из работы Аскадского А.А. Вследствие релаксационного характера явления стеклования, важно уточнить какими методами и в каких условиях получены результаты измерений температуры стеклования. Хотелось бы учесть влияние и методических факторов на значение температуры стеклования

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку работы. Полученные автором результаты, выводы и заключения обоснованы, достоверность обеспечена корректным применением методов машинного обучения, верификацией на обширном экспериментальном материале и согласованием с классическими теориями стеклования. Важно отмечено развитие научной темы дальнейших исследований: учет в предложенной модели влияния стереорегулярности, молекулярно-массовых характеристик и степени кристалличности органических гомополимеров

Диссертация Шадриной Г.Р. является самостоятельным научным исследованием, обладает научной новизной; представляет собой законченную научно-квалификационную работу, соответствующую паспорту специальности 1.4.3 «Органическая химия» (пп 4 и 7), и пп. 9-14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 (в действующей редакции), а её автор, Шадрина Гузель Руслановна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности.

Я, Темникова Елизавета Вячеславовна, даю согласие на обработку персональных данных, включение их в аттестационное дело соискателя и размещения на сайте.

И.о. заведующего кафедрой
нефтехимического синтеза
НХТИ ФГБОУ ВО «КНИТУ»,
кандидат химических наук 1.4.7 (02.00.06)
«Высокомолекулярные соединения».

Темникова
Елизавета
Вячеславовна

Полное наименование: Нижнекамский химико-технологический институт (филиал) федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет»
Почтовый адрес: РФ, 423578, г. Нижнекамск, пр. Строителей, д.47 (корпус «А»)
Тел.: +7 (917) 898-44-41; e-mail: e.temnikova@nchti.ru
Дата составления: 10.06.26

Подпись доцента Е.В. Темниковой заверяю

Начальник отдела кадров НХТИ ФГБОУ ВО «КНИТУ»



Ерашова М.М.

Вход. № 05-9096
« 29 » 06 2026 г.
подпись