

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 Шадриной Г.Р. решает **актуальную и практически значимую задачу** – количественное прогнозирование температуры стеклования органических гомополимеров по структуре повторяющегося звена. Проблема здесь заключается не столько в подборе очередной модели машинного обучения с высоким R^2 , сколько в том, чтобы полученные зависимости можно было интерпретировать с позиций теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров. Именно это отличает работу автора от подавляющего большинства публикаций в области «структура-свойство» для полимеров (в том числе, органических гомополимеров).

Научная новизна и практическая ценность. Автор не просто констатирует, что «случайный лес» лучше, чем «многослойный перцептрон», а сознательно вводит в модель три параметра А, В, С, аналогичные инкрементам А.А. Аскадского, и затем уточняет их с помощью комбинированных дескрипторов, включающих экспериментальные значения температуры стеклования органических гомополимеров. Это позволило не только повысить точность (средний $R^2 = 0.85$ после уточнения), но и количественно подтвердить, что температура стеклования органических гомополимеров прямо пропорциональна параметру А (мера гибкости) и обратно пропорциональна сумме В + С (межмолекулярные взаимодействия + свободный объем). Особенно убедительно выглядит пример с полистиролами, замещенными в орто-, мета- и пара-положениях: модель на отпечатках Моргана различает изомеры, тогда как инкрементальный подход и структурные ключи этого не делают (R^2 возрастает с 0.12 до 0.81). Корреляции параметра В с дипольным моментом, поляризуемостью, энергией НОМО–LUMO придают физический смысл «черному ящику». Практическая ценность подкреплена готовым программным кодом на Python.

Достоверность обеспечена объемом базы (822 полимера), нормальным распределением значений температуры стеклования, кросс-валидацией и 50-кратным повторением вычислительных экспериментов.

Замечание (не снижающее высокой оценки работы):

В исходной базе данных приведены значения температуры стеклования полимеров, полученные разными методами (ДСК, ТМА, дилатометрия),

которые фиксируют структурное или механическое стеклование. Это дает систематический разброс до 15-20 К для одного полимера. В модели этот разброс воспринимается как «шум», но автором не проведен анализ ее чувствительности к выбору методики измерений. Следовало бы либо ввести поправки на метод, либо показать, что они не влияют на основные выводы.

Заключение. Диссертационная работа Шадринной Г.Р. является законченным исследованием, в котором решена задача построения интерпретируемой модели «структура – температура стеклования» для органических гомополимеров. Работа полностью соответствует требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утв. Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г.), а ее автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Доктор химических наук

(1.4.4. (02.00.04) Физическая химия, 1.4.3. (02.00.03) Органическая химия),

ведущий научный сотрудник

лаборатории стереохимии

сорбционных процессов (№ 314)

ИНЭОС РАН

Даю согласие на обработку персональных данных.

Ирина Анатольевна Хотина

25.06.2026

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН), 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1, <https://ineos.ac.ru/>,

e-mail; larina@ineos.ac.ru

Контактный телефон: +7(499)135-92-02

Подпись д.х.н. И.А. Хотинной



Ученый секретарь ИНЭОС РАН, к.х.н.

Е.Н. Гулакова

Дата « 25 » июня 2026 г.