

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

диссертационного совета 24.2.312.03, созданного на базе
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Казанский национальный исследовательский
технологический университет»

Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № ___
решение диссертационного совета от 03.07.2026 г. №19

О присуждении Шадриной Гузель Руслановне, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Анализ связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров» по специальности 1.4.3. Органическая химия принята к защите 30 апреля 2026 г., протокол заседания №13, диссертационным советом 24.2.312.03, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования (ФГБОУ ВО) «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, приказ о создании диссертационного совета №426-154 от 12.03.2010 г. (приказом Минобрнауки России №75/нк от 15.02.2013 г. совет признан соответствующим действующему «Положению о совете ...»; приказом Минобрнауки России №561/нк от 03.06.2021 г. диссертационному совету 24.2.312.03 установлены полномочия по защитах диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на срок действия номенклатуры научных специальностей).

Соискатель Шадрина Гузель Руслановна, 16 июля 1997 года рождения, в 2021 г. окончила федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» по направлению подготовки 20.04.01 Техносферная безопасность. В период подготовки диссертации с 2021 г. по 2025 г. являлась аспирантом очной формы обучения ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет». В настоящее время Шадрина Гузель Руслановна работает в ООО «Специалист-Консалтинг» в должности ведущего специалиста по охране труда и промышленной безопасности.

Диссертация выполнена на кафедре общей химической технологии

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Улитин Николай Викторович, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», кафедра общей химической технологии, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

Колчина Галина Юрьевна, доктор технических наук, доцент, Стерлитамакский филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», кафедра химии и химической технологии, профессор;

Межуев Ярослав Олегович, доктор химических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», кафедра биоматериалов, заведующий кафедрой, – дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования (ФГАОУ ВО) «Казанский (Приволжский) федеральный университет», г. Казань – в своем положительном отзыве, подписанном Антипиным Игорем Сергеевичем, доктором химических наук, профессором, членом-корреспондентом Российской академии наук, профессором кафедры органической и медицинской химии и утвержденном Туриловой Екатериной Александровной, доктором физико-математических наук, доцентом, проректором по образовательной деятельности, указала, что диссертация Шадриной Г.Р. является завершенной научно-квалификационной работой и соответствует паспорту специальности 1.4.3.Органическая химия по пунктам 4 и 7. В ней решена задача, имеющая существенное значение для развития органической химии как отрасли науки: создана интерпретируемая модель машинного обучения для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров, которая на количественном уровне связывает строение повторяющегося звена с макроскопическим свойством через физически осмысленные параметры (гибкость, межмолекулярные взаимодействия, свободный объем). Модель верифицирована на независимой выборке и оформлена в виде программного кода. Автор диссертации заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по соответствующей специальности.

Соискатель имеет 7 опубликованных научных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 7 работ объемом 2.25 печатных листа (личный вклад соискателя 80%), из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 2 статьи. Публикации посвящены созданию интерпретируемой

модели машинного обучения «структура повторяющегося звена – температура стеклования органического гомополимера», согласующейся с теорией строения органических соединений и теориями стеклования полимеров.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, заимствованный материал без ссылок на автора и(или) источник заимствования, а также результаты научных работ, выполненных в соавторстве, без ссылок на соавторов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Шадрина, Г.Р. Гибридный подход при прогнозировании температур стеклования органических гомополимеров: сочетание модели QSPR и метода инкрементов / Г.Р. Шадрина, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, А.А. Балдинов, Н.В. Улитин, Я.Л. Люлинская, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян // Вестник технологического университета. – 2025. – Т. 28, №3. – С. 68-74.

2. Улитин, Н.В. Интерпретация закономерности «структура-температура стеклования» для органических гомополимеров с использованием методов инкрементов и «случайного леса», а также теории функционала плотности / Н.В. Улитин, Г.Р. Шадрина, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, А.А. Балдинов, Я.Л. Люлинская, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян // Журнал структурной химии. – 2025. – Т. 66, №5. – Статья 147275.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

– от заместителя генерального директора по технологическому развитию ООО «Оил ресурс», д.т.н. Прочухана К.Ю.; отзыв положительный, имеется замечание: Не обсуждается влияние молекулярной массы 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.

– от директора мегафакультета наук о жизни, профессора научно-образовательного центра инфохимии Федерального государственного автономного образовательного учреждения «Национальный исследовательский университет ИТМО», д.х.н. Скорб Е.В.; отзыв положительный, имеется замечание: 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.

– от профессора кафедры физической химии и химической экологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», д.х.н.,

доцента Хайруллиной В.Р.; отзыв положительный, имеются замечания: 1. Корреляционный анализ параметров А и В с квантово-химическими параметрами проведен только для замещенных полистиролов. Распространимость выводов по результатам корреляционного анализа на другие виды органических гомополимеров остается открытой. 2. Между параметрами В и С отмечается обратная корреляция, но из диаграмм размаха (рис. 5) это визуально очевидно не для всех рядов замещенных полистиролов. Следовало привести коэффициенты корреляции между В и С.

– от директора Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, д.х.н. Сабирова Д.Ш.; отзыв положительный, имеются вопросы и 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), что оставляет интерпретацию параметра С на уровне гипотезы.

– от исполняющего обязанности заведующего кафедрой нефтехимического синтеза Нижнекамского химико-технологического института (филиала) федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», к.х.н. Темниковой Е.В.; отзыв положительный, имеются замечания: 1. Из автореферата не вполне ясно, каким образом осуществлялся учет 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. Использованные 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.

– от ведущего научного сотрудника лаборатории стереохимии сорбционных процессов (№314) федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, д.х.н., Хотинной И.А.; отзыв положительный, имеется замечание: 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.

– от руководителя лаборатории искусственного интеллекта в новых материалах автономной некоммерческой организации высшего образования «Университет Иннополис» Лукина Р.Ю.; отзыв положительный, имеются замечания: 1. Автором показано преимущество молекулярных отпечатков Моргана по сравнению со структурными ключами при прогнозировании температуры стеклования. Вместе с тем остаётся открытым вопрос о влиянии радиуса отпечатка и длины бинарного вектора на устойчивость модели. Представление анализа чувствительности качества прогнозирования к данным параметрам позволило бы более полно обосновать выбор используемого признакового описания. 2. При построении моделей используется случайное разделение данных на обучающую и тестовую выборки. Для задач прогнозирования свойств химических соединений существенное значение имеет структурная независимость тестового множества. В этой связи представляет интерес оценка разработанной модели при разделении данных по химическим семействам или с использованием кластеризации структур, что позволило бы более объективно оценить способность модели к прогнозированию свойств ранее не встречавшихся классов полимеров. 3. В работе проведена интерпретация параметров инкрементальной модели посредством корреляционного анализа с квантово-химическими характеристиками. Однако использование только коэффициентов корреляции не позволяет однозначно судить о причинно-следственной связи между выявленными зависимостями. Дополнительное применение методов оценки вклада отдельных структурных фрагментов или анализа важности признаков позволило бы усилить физико-химическую интерпретацию разработанной модели. 4. Предлагаемый подход ориентирован на прогнозирование температуры стеклования исходя исключительно из химического строения повторяющегося звена. Между тем известно, что существенное влияние на данную характеристику оказывают молекулярная масса, молекулярно-массовое распределение, степень кристалличности, регулярность строения

макромолекулы и условия получения полимера. Более подробное обсуждение области применимости разработанной модели и факторов, остающихся за пределами рассмотрения, повысило бы практическую ценность исследования.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетентностью в органической химии в области моделирования «структура-свойство», опытом работы и способностью профессиональной оценки научно-практической значимости диссертационного исследования.

Официальные оппоненты и ведущая организация не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– *создана* модель машинного обучения на основе метода случайного леса и молекулярных отпечатков Моргана, способная прогнозировать температуру стеклования органических гомополимеров через параметры, определяющие ее на основе химического строения повторяющихся звеньев по аналогии с инкрементальным подходом; из трех протестированных методов (метод случайного леса, метод к ближайших соседей, многослойный перцептрон) и двух видов дескрипторов (структурные ключи, молекулярные отпечатки Моргана) наибольшую достоверность прогноза показала модель на основе метода случайного леса с использованием молекулярных отпечатков Моргана;

– *уточнены* значения параметров А, В и С, полученных путем их прямого прогнозирования и определяющих температуру стеклования органических гомополимеров по аналогии с инкрементальным подходом, за счет применения комбинированных дескрипторов, объединяющих информацию о химическом строении повторяющихся звеньев и их экспериментальных и рассчитанных в рамках инкрементального подхода значениях температуры стеклования; на примере полистиролов с различными положениями (2-, 3-, 4-) заместителя (фтор-, хлор-, бром-, метил- и этил-) в ароматическом кольце показано, что модель с комбинированными дескрипторами достоверно учитывает положение заместителя (коэффициент детерминации $R^2 = 0.81$), в отличие от инкрементального подхода, не учитывающего положение заместителя ($R^2 = 0.12$);

– *установлено*, что температура стеклования органических гомополимеров прямо пропорциональна параметру А, связанному с молекулярным объемом повторяющегося звена и интерпретируемому как мера гибкости макромолекул (согласуется с термодинамическими и кинетическими теориями стеклования полимеров М.В. Волькенштейна-О.Б. Птицына и Ю.Я. Готлиба-О.Б. Птицына), и обратно пропорциональна сумме параметров В и С, где В характеризует совокупность всех типов межмолекулярных взаимодействий (согласуется с теорией межмолекулярных

связей С.Н. Журкова и флуктуационной теорией стеклования полимеров), S – долю свободного объема (согласуется с теорией свободного объема);

– *выявлена* статистически значимая корреляция электронных свойств повторяющихся звеньев органических гомополимеров с параметром V , характеризующим совокупность межмолекулярных взаимодействий: диполь-дипольных, водородных и электростатических.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что построенная модель «структура – температура стеклования органических гомополимеров» *позволяет получать* результаты, которые могут быть проанализированы в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

Значение полученных результатов для практики подтверждается тем, что:

– *разработано* программное обеспечение для прогнозирования температуры стеклования органических гомополимеров по структуре их повторяющегося звена;

– *созданная модель* «структура – температура стеклования органических гомополимеров» *может применяться* в качестве прогностического модуля при технологическом моделировании промышленных процессов синтеза органических гомополимеров.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

– *созданная модель* «структура – температура стеклования органических гомополимеров» *верифицирована* на обширной базе экспериментальных данных (1050 органических гомополимеров, после фильтрации – 822) с применением 8-кратной кросс-валидации с 50 независимыми повторениями, что обеспечивает статистическую значимость полученных результатов;

– *результаты моделирования согласуются* с положениями теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров.

Диссертация написана соискателем самостоятельно. Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных данных, реализации решения задач исследования, анализе результатов, формулировании заключения и участии в написании и подготовке публикаций.

Соискатель Шадрина Г.Р. исчерпывающе ответила на прозвучавшие в ходе заседания замечания и вопросы. С рядом высказанных замечаний соискатель согласилась.

Диссертационным советом сделан вывод, что рассматриваемая диссертация является научно-квалификационной работой и соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней (Постановление Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г. в действующей редакции).

На заседании 03.07.2026 г. диссертационный совет принял решение присудить Шадринной Гузель Руслановне ученую степень кандидата

