

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ахметшиной Екатерины Степановны
представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по
специальности 1.4.4 – Физическая химия

По моему мнению, диссертационная работа Ахметшиной Е.С. имеет большое значение для вычислительной химии. Предложенный ею метод позволяет оценить энтальпию образования и энергию напряжения циклических органических молекул без ресурсоёмких расчётов или экспериментов. Подобные модели особенно полезны при экстенсивном переборе молекулярных структур, когда требуется быстрая оценка свойств каждой из многочисленных рассматриваемых молекул.

К работе имеются следующие замечания:

- 1) Набор молекул, с которыми проводились исследования, кажется ограниченным. Все ли возможные циклические молекулы были рассмотрены? Сейчас доступны огромные молекулярные базы данных и программное обеспечения для работы с ними.
- 2) С точки зрения анализа данных, рассматриваемая задача является классической задачей машинного обучения. На мой взгляд, применение нейронных сетей было бы оправдано и могло бы улучшить точность результатов.
- 3) Данные представлены так, что ими довольно сложно воспользоваться сторонним исследователям из смежных областей. Я советую на основе полученных результатов написать программу, автоматически обрабатывающую координатный файл, описывающий молекулу. Такая программа могла бы стать популярной.

Указанные замечания не портят общего положительного впечатления от работы. На основании автореферата можно заключить, что диссертационная работа Ахметшиной Е.С. соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, согласно п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (с последующими дополнениями), а Ахметшина Екатерина Степановна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия.

Доктор физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, профессор кафедры Физики конденсированных сред федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (Москва, Каширское ш., 31; сайт организации: www.mephi.ru; e-mail организации: info@mephi.ru) Тел. +79060669248; e-mail: KPKatin@mephi.ru. Согласен на обработку персональных данных.

 Катин Константин Петрович

03.09.2024

Подпись ЗАВЕРЯЮ
ДИРЕКТОР ДЕПАРТАМЕНТА
КАДРОВОЙ ПОЛИТИКИ
Д. В. ВАСИЛЬЧЕНКО



