

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Тепляшина Никиты Владимировича
**«Квантовохимическое исследование механизмов сборки S-гетероциклов из
2-хлорпропен-2илсульфидов в системе KOH/N₂H₂·H₂O»,**
представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук
по специальности «1.4.4. Физическая химия».

В современном мире химия гетероциклических соединений, имеющих значительную роль в живой природе и широко применяемых в различных отраслях экономики, развивается интенсивными темпами. Учитывая, что халькогенсодержащие гетероциклические фрагменты входят в состав многих биологически активных соединений, тематика получения новых гетероциклических соединений, является одной из ключевых задач органической химии. Несмотря на это, механизмы многих реакций, приводящих к образованию, в частности, серосодержащих гетероциклов, до сих пор недостаточно изучены. В настоящее время немалый вклад в развитие изучения механизмов их формирования вносят квантовохимические расчетные методы, позволяющие как проводить более осознанную интерпретацию полученных экспериментальных данных, так и прогнозировать возможные пути реакции, приводящие к получению ценных продуктов. Особенно важным в данном вопросе является проведение мостика между химиками-экспериментаторами и химиками-теоретиками, плодотворное сотрудничество которых несомненно повышает эффективность проводимых исследований. Учитывая, что в настоящей работе прослеживается данный вид взаимодействия, считаю, что это безусловно подчеркивает важность и актуальность проведенных исследований.

В представленной диссертационной работе следует отметить значительный объем проделанной автором работы: подбор и обоснованный выбор менее ресурсоемкого расчетного метода для проведения работы, огромный массив проведенных расчетов для моделей с целью построения реакционных профилей, проработка большого количества вариантов химических превращений, ставших основой для предложенных автором механизмов образования дитиинов, сведения всех результатов в массив данных и его последующая тщательная интерпретация, а также проведение дополнительных теоретических кинетических исследований многомаршрутной каскадной сборки дитиинов в рамках предложенных механизмов.

Текст автореферата отражает структуру диссертационной работы, поскольку в нем содержатся все обязательные элементы, а также представлены результаты исследования и их обсуждения.

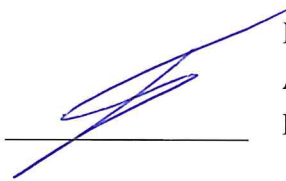
Поставленные цели исследования соискателем достигнуты, задачи – решены. Достоверность научных результатов и выводов подтверждается применением современных методов квантовой химии, реализованных в программном пакете Gaussian 16, с использованием DFT методов (B2PLYP-D2/6-311+G**//B3LYP/6-31+G*) и прецизионного комбинированного подхода (CBS-Q//B3), учетом влияния растворителя и сопоставлением расчетных значений с экспериментальными параметрами, моделированием кинетических зависимостей в программе KINET, а также опубликованием по результатам исследований публикаций в рецензируемых научных изданиях. Учитывая общее количество научных работ (8 публикаций), в том числе 2 научные статьи, опубликованные в зарубежных рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ, степень апробации материалов не вызывает сомнений.

В ходе ознакомления с авторефератом возникли следующие вопросы и замечания:

1. На стр.10 автор говорит об образовании комплекса 5.5, однако в тексте и на схемах автореферата данного комплексного соединения не обнаружил.
2. На схеме 4 показано образование соединений 5.II и 5.III с общим выходом в 33%. Какая форма все же больше преобладает в продукте?
3. В тексте автореферата на стр. 11 говорится, что «Внутримолекулярная циклизация 5.13 в 2,6-диметилдитиин (R15) кинетически менее предпочтительна, чем реакция олигомеризации (R17) с ещё одной молекулой метилидентиирана 5.25 на 7.5 ккал/моль». Судя по схеме, допущена опечатка, так как ранее молекула «метилидентиирана» обозначалась 4.25.
4. Прошу пояснить небольшое противоречие между результатами квантовохимических расчетов и кинетического моделирования. В ходе расчетов автор говорит, что внутримолекулярная циклизация 5.13 в 2,6-диметилдитиин (R15) кинетически менее предпочтительна, чем реакция олигомеризации (R17), тогда как при кинетическом моделировании вдруг получается, что маршрут внутримолекулярной циклизации все же оказывается единственно реализуемым.

Представленные замечания носят дискуссионный характер и не уменьшают ценности проведенного диссертационного исследования, соответствующего паспорту специальности «1.4.4 Физическая химия». По актуальности, новизне, научной и потенциально практической значимости, достоверности полученных результатов и объему проведенных исследований диссертационная работа **соответствует требованиям пунктов 9-14 Положения о порядке присуждения учёных степеней**, утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (в текущей редакции), а ее автор, Тепляшин Никита Владимирович, **заслуживает присуждения** искомой учёной степени кандидата химических наук по специальности «1.4.4. Физическая химия».

Эксперт по научной работе Департамента научно-исследовательской работы Блока химических проектов Общества с ограниченной ответственностью «Иркутская нефтяная компания» (ООО «ИНК»), канд. хим. наук (специальность «1.4.14. – Кинетика и катализ»)


Илья
Аркадьевич
Бабенко

664007, г. Иркутск, Большой Литейный пр-кт, д. 4
раб. Тел.: (3952) 211-352, доп. 2664
e-mail: Babenko_IA@irkutskoil.ru

«17» августа 2026 г.

Подпись эксперта по научной работе
И.А. Бабенко удостоверяю:

