

Отзыв на автореферат диссертации

Тепляшина Никиты Владимировича

«Квантовохимическое исследование механизмов сборки *S*-гетероциклов из 2-хлорпропен-2-илсульфидов в системе $\text{KOH}/\text{N}_2\text{H}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ »,

представленной на соискание ученой степени

кандидата химических наук

по специальности 1.4.4 – физическая химия

Актуальность темы диссертации в первую очередь обусловлена сочетанием практической значимости изучаемых классов соединений и объективной сложности экспериментального исследования закономерностей в их реакционной способности. В данной работе квантовохимическими методами подробно исследован ряд механизмов реакций с участием 2-хлорпропен-2-илсульфидов, рассмотрено несколько десятков элементарных стадий, для которых проведены расчеты кинетических и термодинамических параметров. Многомаршрутность процессов сборки гетероциклов, одновременное присутствие в реакционной смеси различных промежуточных продуктов и многокомпонентность самой среды крайне затрудняет установление и анализ большинства элементарных стадий; тем не менее, поставленные задачи решены автором в полном объеме.

Необходимо отметить лаконичность и содержательность формулировок, наглядность иллюстраций и в целом доступный стиль изложения автореферата, создающего приятное впечатление и вызывающего интерес к диссертации.

Вопросы:

1. Программный пакет Gaussian 16, помимо расчетного значения газофазной энтропии, выдает четыре ее компонента – вклады за счет колебательных, вращательных и поступательных степеней свободы и вклад за счет электронных возбуждений. При переходе от газофазного состояния к раствору логично было бы применить линейную коррекцию к поступательному вкладу, масштабирующий коэффициент (scale-factor) – к колебательному, оставить без изменений электронный вклад и вовсе не учитывать вращательный вклад. В работе линейная коррекция была применена к общей величине энтропии. Верифицировался ли такой упрощенный подход к учету энтропийного вклада при расчетах термодинамических характеристик?
2. Поляризующее действие катионов (даже слабокоординирующих) теоретически может повлиять на кинетику элементарных стадий с участием анионов. Оценивалось ли влияние учета сопутствующего противоиона K^+ на расчетные величины кинетических барьеров?

Замечания:

1. В тексте автореферата имеется несколько опечаток: на стр. 9 во втором предложении «Образующийся» вместо «Образующееся»; на стр. 10 в последнем предложении предпоследнего абзаца «замещение» вместо «замещения»; на стр. 12 в предпоследнем абзаце «2,6-диметил-1,4-дитиин» вместо «2,6-диметил-1,4-дитиина».
2. На Схеме 5 не изображен комплекс 5.5, упоминаемый в сопутствующем тексте.

Вышеизложенные вопросы и замечания не касаются положений, выносимых на защиту, не вызывают сомнений в выводах, представленных в диссертационной работе, и не влияют на общее положительное впечатление.

Анализ автореферата и публикаций позволяет заключить, что диссертационная работа Н.В. Тепляшина «Квантовохимическое исследование механизмов сборки S-гетероциклов из 2-хлорпропен-2-илсульфидов в системе $\text{KOH}/\text{N}_2\text{H}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ » представляет собой полноценное самостоятельное научное исследование, выполненное на высоком академическом уровне и полностью соответствующее паспорту специальности 1.4.4 – физическая химия (химические науки). Представленная работа отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук в соответствии с пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г. (в текущей редакции), а ее автор Тепляшин Никита Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

10.08.2026

кандидат химических наук (02.00.04 – физическая химия),
старший преподаватель кафедры общей химии и методики преподавания
химии химического факультета Белорусского государственного университета



Кульша Андрей Вячеславович/

Белорусский государственный университет

Почтовый адрес: 220030, Республика Беларусь, г. Минск, пр. Независимости, 4

E-mail: kulshaav@bsu.by

Телефон: +375 29 5003558