

ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации

Яруллина Айдара Римовича

"Кинетические закономерности и механизм химических трансформаций ароматических нитрозооксидов и первичных продуктов их орто-циклизации-6-оксо-гекса-2,4-диен-нитрилоксидов",

представленной на соискание учёной степени

кандидата химических наук

по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Яруллина А. Р. посвящена изучению электронного строения, термодинамических и кинетических свойств перспективных циклических азотсодержащих пероксидов. Изученные вещества относятся к высокореакционным соединениям и интермедиатам, возникающим в ходе реакций. Таким образом, зная их свойства, появляется возможность управлять ходом и скоростью реакции, что очень важно при создании эффективных технологий. Все сказанное делает представленную научную работу актуальной и направленной на создание технологического суверенитета.

Диссертантом проделана большая теоретическая и экспериментальная работа по экспериментальному определению кинетических параметров молекул в конденсированной и газовой фазах. Было установлено геометрическое строение, колебательные спектры, энтальпии образования и изомеризации. Большое количество полученных экспериментальных данных, характеризующих индивидуальные соединения, могут быть использованы для калибровки квантово-химических методов с последующими расчётами неизвестных свойств.

Диссертация представляет собой большую законченную работу, результаты которой опубликованы в рецензируемых журналах, входящих в список ВАК и индексируемых ведущими базами данных, и доложены на российских конференциях.

В своём отзыве хочу отметить некоторую неполноту сведений, изложенных в автореферате, т.е. опущены некоторые важные моменты.

- В разных местах есть упоминания химического потенциала. Из текста понятно, что это термодинамический (парциальная

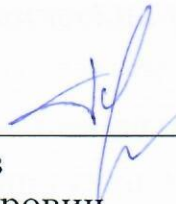
свободная энергия Гиббса), а не электронный химический потенциал. Но нигде не сказано, как он был получен теоретически? Как была определена энтропия и вклады смещения, концентрация конформеров, их мольные доли?

- На странице 8 пункт 1.1 изложен плохо. Видимо, что-то из пояснений пропущено;
- Непонятно, почему корреляции привязаны к константам Гаммета. Никаких пояснений и доказательств в пользу их использования нет. Это эмпирические величины, в свою очередь найденные из корреляций, что при перепараметризации позволяет проводить подгонку данных под результат и не позволяет оценить погрешность полученных чисел;
- В работе много термодинамических величин, при этом для большинства из них не указана температура. (Термодинамические величины при разных температурах разные);
- На Рисунке 4 по осям ординат не приведены величины и единицы измерения;
- Нужно пояснить, почему в тексте на страницах 16 – 18 ход и направление реакций характеризуются (определяются) энтальпиями, а не свободными энергиями? Может быть с этим связаны противоречия, относящиеся к Рисунку 10?

Указанные замечания не относятся к сути работы и не снижают её научной ценности.

Считаю, что кандидатская диссертация Яруллина А. Р. на тему "Кинетические закономерности и механизм химических трансформаций ароматических нитрозооксидов и первичных продуктов их орто-циклизации-6-оксо-гекса-2,4-диен-нитрилоксидов" представляет законченное научное исследование, по своей актуальности, научной новизне, достоверности и практическому значению соответствует критериям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 (в редакции 2017 г.), а ее автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия.

Рецензент
заведующий кафедрой медицинской
биофизики ФГБОУ ВО Тверского
ГМУ Минздрава России,
доктор физико-математических
наук
(1.4.4. Физическая химия),
доцент
email: turtsma@tversu.ru


Туровцев Владимир
Владимирович

Подпись Туровцева В.В. заверяю

«10» октября 2025 г.



170100, г. Тверь, ул. Советская, д. 4, Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Тверской государственный медицинский университет» Министерства
здравоохранения Российской Федерации, тел. +7 4822 321170
email: info@tvghmu.ru, info@tvghma.ru