

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о Гнатовском Григории Руслановиче, соискателе учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия, представляющем диссертационную работу «Квантовохимическое исследование механизмов образования пиразолов и 2-пиразолинов из ацетиленов, кетонов, гидразина и его производных в суперосновных средах»

Григорий Русланович Гнатовский занимается научной работой в области квантовохимического моделирования механизмов органических реакций с 2018 года (2-й курс бакалавриата химического факультета Иркутского государственного университета). С 2019 г. принят на должность лаборанта-исследователя в лабораторию квантовой химии ИГУ, затем в лабораторию квантовохимического моделирования молекулярных систем (ЛКХММС) ИГУ. В 2022 г. Г.Р. Гнатовский с отличием окончил магистратуру химического факультета, был избран на должность младшего научного сотрудника ЛКХММС и поступил в очную аспирантуру ИрИХ СО РАН, с 2025 г. по совместительству принят на должность младшего научного сотрудника ЛНГС ИрИХ СО РАН.

Гнатовский Г.Р. активно занимается научной работой в ИрИХ СО РАН и ИГУ. Его диссертационная работа связана с исследованиями механизмов, открытых в ЛНГС реакций образования азотсодержащих гетероциклических соединений, а также является составной частью научного направления ФГБОУ ВО «ИГУ» «Разработка и применение неэмпирических методов и моделей квантовой химии для исследования строения, свойств и реакционной способности молекул в основном и возбужденных состояниях», выполняемом в ЛКХММС. Григорий Русланович был и выступает исполнителем грантов государственного задания Минобрнауки РФ, дважды становился призёром грантового конкурса проектов аспирантов и студентов ИрИХ СО РАН.

Диссертационное исследование Гнатовского Г.Р. направлено на изучение механизмов и поиск закономерностей, позволяющих повысить выход и селективность синтеза пиразолов и пиразолинов – фармацевтически и промышленно ценных гетероциклов – из простых и доступных ацетиленов, кетонов и гидразина или его производных в суперосновных средах. Это обуславливает практическую актуальность работы. Фундаментальная значимость работы связана с получением новых знаний о суперосновных системах и механизмах реакций ацетиленов в них.

Представленные в диссертации результаты являются оригинальными и отличаются высокой научной новизной. В частности, в работе предложен и

обоснован механизм сборки формилпиразолинов, отличный от предполагаемого в эксперименте. Так, кинетически выгодный путь к формилпиразолинам проходит через реакцию гидразина с α,β -ненасыщенными кетонами (присоединение по $C=C$ связи), тогда как взаимодействие гидразина с β,γ -ненасыщенным кетоном уводит реакцию в β,γ -ненасыщенный формилгидразон, из которого существенно труднее образуется целевой продукт. Полученные результаты можно использовать для увеличения выхода продукта, запуская в реакцию только α,β -ненасыщенный кетон. В рамках исследования сборки пиразолов из арилазинов и ацетиленов установлены селективность-определяющие стадии, показано влияние природы основания. Используя эти результаты, можно управлять селективностью, смещая реакцию в сторону одного из продуктов за счет выбора основания (например, по размеру его катиона).

За время выполнения работы Гнатовский Г.Р. уже на первой задаче проявил исследовательский энтузиазм и, несмотря на первоначальные, долгие, но безуспешные попытки отыскать преодолимые в условиях эксперимента барьеры на пути сборки формилпиразолина, продолжал искать альтернативные механизмы. Эти трудности сформировали в нём способность самостоятельно формулировать задачи исследования и интерпретировать полученные результаты.

В процессе выполнения диссертационной работы Гнатовский Г.Р. освоил современные методы квантовой химии и подходы к моделированию механизмов реакций на основе высокоуровневых квантовохимических расчетов. Результаты диссертационной работы Гнатовского Г.Р. вошли в материалы 3 статей рецензируемых журналах: 2 статьи в Asian Journal of Organic Chemistry (K1 ВАК) и 1 статья в Russian Chemical Bulliten (K1 ВАК). Работа апробирована на одной международной конференции и 4-х всероссийских конференциях. Опубликовано и индексируются в РИНЦ тезисы 6 докладов.

Считаю, что Гнатовский Г.Р. по уровню профессиональной подготовки, личному вкладу в проведённые научные исследования заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Научный руководитель:

ведущий научный сотрудник лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ФГБОУ ВО «ИП УрО РАН», доцент

2 июня 2026 г.

