

Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Гнатовского Григория Руслановича «Квантовохимическое исследование механизмов образования пиразолов и 2-пиразолинов из ацетиленов, кетонов, гидразина и его производных в суперосновных средах»

ФИО оппонента	Киселев Виталий Георгиевич
Ученая степень (с указанием отрасли науки, шифра и наименования научной специальности, по которым защищена диссертация)	Кандидат физико-математических наук 01.04.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества
Ученое звание	
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы оппонента на момент представления отзыва	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук
Должность, занимаемая оппонентом в организации	Старший научный сотрудник
Наименование подразделения	Лаборатория квантовой химии и компьютерного моделирования
Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	1. Solid- vs. liquid-state thermal decomposition: thermolysis of halogenated benzene derivatives with the 2-nitrodiazene-1- <i>N</i> -oxide moiety / N.V. Muravyev, D.K. Pronkin, N.E. Leonov, M.S. Klenov, V.G. Kiselev , A.N. Pivkina // Physical Chemistry Chemical Physics — 2026. — Vol. 28, N. 3. — P. 2164-2177. DOI: 10.1039/d5cp03707g 2. Kinetic Isotope Effect in the Unfolding of a Protein Secondary Structure: Calculations for Beta-Sheet

- Polyglycine Dimers as a Model / A.O. Yanshin, **V.G. Kiselev**, A.V. Baklanov // *Biomolecules* — 2025. — Vol. 15, N. 1. — P. 92. DOI: 10.3390/biom15010092
3. Metal-Free Reversible Double Cyclization of Cyanuric Diazide to an Asymmetric Bitetrazolate via Cleavage of the Six-Membered Aromatic Ring / S. Vaddypally, A.N. Byrne, C.F. Goldsmith, M.J. Zdilla, **V.G. Kiselev** // *Inorganic Chemistry* — 2024. — Vol. 63, N. 5. — P. 2322-2326. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c04338
4. Too fast and too furious: thermoanalytical and quantum chemical study of the thermal stability of 4,4'-dinitro-3,3'-diazenofuroxan / **V.G. Kiselev**, A.R. Sadykov, I.N. Melnikov, I.V. Fomenkov, L.L. Fershtat, A.N. Pivkina, N.V. Muravyev // *Physical Chemistry Chemical Physics* — 2024. — Vol. 26, N. 47. — P. 29541-29551. DOI: 10.1039/d4cp02836h
5. New Mechanistic Insights into the Primary Thermolysis Reactions of 1,3,4,6-Tetranitrooctahydroimidazo-[4,5-*d*]imidazole (BCHMX) from Predictive Local Coupled Cluster Calculations / I.N. Melnikov, A.N. Pivkina, **V.G. Kiselev** // *The Journal of Physical Chemistry A* — 2023. — Vol. 127, N. 51. — P. 10860-10871. DOI: 10.1021/acs.jpca.3c06352
6. A detailed chemical kinetic mechanism of 1,1-diamino-2,2-dinitroethylene (FOX-7) initial decomposition in the gas phase / J.-Y. Lyu, Q. Zhu, X. Bai, X. Ren, J. Li, D. Chen, **V.G. Kiselev**, Y. Li, W. Yang // *Combustion and Flame* — 2023. — Vol. 255 — P. 112877. DOI: 10.1016/j.combustflame.2023.112877
7. The Nature of the Enthalpy-Entropy Compensation and "Exotic" Arrhenius Parameters in the Denaturation Kinetics of Proteins / A.V. Baklanov, **V.G. Kiselev** // *International Journal of Molecular Sciences* — 2023. — Vol. 24, N. 13. — P. 10630. DOI: 10.3390/ijms241310630
8. Thermochemistry, Tautomerism, and Thermal Stability of 5,7-Dinitrobenzotriazoles / I.N. Melnikov, **V.G. Kiselev**, I.L. Dalinger, A.M. Starosotnikov, N.V. Muravyev, A.N. Pivkina // *International Journal of Molecular Sciences* — 2023. — Vol. 24, N. 6. — P. 5330. DOI: 10.3390/ijms24065330

9. A new look at the structure of the neutral Au₁₈ cluster: hollow *versus* filled golden cage / P.V. Nhat, N.T. Si, A. Fielicke, **V.G. Kiselev**, M.T. Nguyen // Physical Chemistry Chemical Physics — 2023. — Vol. 25, N. 13. — P. 9036-9042. DOI: 10.1039/d2cp05422a
10. Thermal stability of energetic 6,8-dinitrotriazolo[1,5-a]pyridines: Interplay of thermal analysis and quantitative quantum chemical calculations / I.N. Melnikov, **V.G. Kiselev**, M.A. Bastrakov, I.L. Dalinger, A.N. Pivkina // Thermochimica Acta — 2022. — Vol. 717. — P. 179342. DOI: 10.1016/j.tca.2022.179342
11. Cationic structure of premixed near-stoichiometric CH₄/O₂/Ar flames at atmospheric pressure: New insights from mass spectrometry, quantum chemistry, and kinetic modeling / D.A. Knyazkov, I.E. Gerasimov, T.A. Bolshova, **V.G. Kiselev**, A.G. Shmakov, A.A. Paletsky // Combustion and Flame — 2022. — Vol. 241 — P. 112106. DOI: 10.1016/j.combustflame.2022.112106

Официальный оппонент

В.Г. Киселев

Сведения и подпись В.Г. Киселева удостоверяю

Ученый секретарь ИХКГ СО РАН
К.ф.-м.н.

А.П. Пыряева

«07» июля 2026 г.

