

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Гнатовского Григория Руслановича «Квантовохимическое исследование механизмов образования пиразолов и 2-пиразолинов из ацетиленов, кетонов, гидразина и его производных в суперосновных средах», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Гнатовского Григория Руслановича посвящена исследованию механизмов сборки 2-пиразолинов и пиразолов на основе реакций кетонов, ацетиленов и производных гидразина в суперосновных средах, на примере ДМСО. В работе проанализированы кинетические и термодинамические характеристики предполагаемых маршрутов, на основе посчитанных термодинамических (изменение энергии Гиббса) и кинетических (активационные барьеры) параметров предположены предпочтительный механизм реакции и причины обнаружения в эксперименте промежуточного продукта и побочных реакций.

Автореферат диссертационной работы содержит все необходимые разделы, в нем подробно изложены актуальность, степень разработанности темы, новизна работы, теоретическая и практическая значимость, однако, разделы «Актуальность темы» и «Степень разработанности темы» заканчиваются практически идентичными предложениями. Работа содержит в себе потенциал для применения с точки зрения оптимизации условий проведения реакции и повышения селективности и выхода продукта в конкретном синтезе.

По тексту автореферата имеются замечания. 1. В тексте автореферата указаны выбранные расчетные приближения и программные комплексы, но не понятен порядок работы самого исследователя: с какого комплекса начинался расчет маршрута реакции, каким образом задавалось направление пути реакции. 2. Не совсем понятно, как были построены схемы реакционных профилей, так как на них обозначены не все точки, где происходит смена направления реакции.

Несмотря на указанные выше замечания, диссертационная работа «Квантовохимическое исследование механизмов образования пиразолов и 2-пиразолинов из ацетиленов, кетонов, гидразина и его производных в суперосновных средах» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Гнатовский Григорий Русланович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.
Д.х.н. (02.00.04 – Физическая химия), профессор, зав. НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов, профессор кафедры теоретической и прикладной химии, ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», Барташевич Екатерина Владимировна
тел. +79123137705; e-mail: bartashevichev@susu.ru


15.09.2026

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.
К.х.н. (02.00.04 – Физическая химия), н.с. НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)» Бородина Ольга Сергеевна
тел. +79123115488; e-mail: borodinaos@susu.ru
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: +7 (351) 267-99-00 info@susu.ru, <http://www.susu.ru>


15.09.2026



С.А. Старикова
С.А. СТАРИКОВА
УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ ЦЕНТР
КАДРОВ
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА
СТАРИКОВА Е.А.