

## Отзыв

**на автореферат диссертации Ахметшиной Екатерины Степановны  
«Развитие концепции полного набора гомодесмотических реакций для  
анализа молекулярной энергетики органических веществ с невалентными  
эффектами стерической и электронной природы», представленной на  
соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 1.4.4. – «Физическая химия»**

В диссертационной работе Ахметшиной Екатерины Степановны рассматривается оригинальная концепция полного набора гомодесмотических реакций (ГДР) для оценки молекулярной энергетики органических соединений со стерическими и электронными эффектами строения.

Тема диссертационной работы, представляет, во-первых, значительный фундаментальный интерес, так как направлена на определение кинетических и термодинамических параметров органических соединений, а во-вторых, технологический, так как эти параметры необходимы для анализа химических превращений и разработки технологий на их основе. Работу также отличает систематический характер исследований, включающий анализ классических и современных подходов к определению молекулярной энергетики соединений и последовательное развитие подхода ГДР для точного описания циклических соединений.

В ходе исследования автор успешно продемонстрировала применимость своей концепции на примере циклических соединений со значительным стерическим напряжением и радикалов, у которых есть взаимодействие неспаренного электрона с ближайшими заместителями.

Автор усовершенствовал концепцию полного набора гомодесмотических реакций, получив интересные результаты и адаптировал эту концепцию для оценки энергии стерического напряжения в циклах.

Таким образом, анализ представленных в автореферате данных позволяют судить о высокой ценности работы Ахметшиной Е.С. для дальнейшего развития концепции ГДР применительно к соединениям с циклической структурой и лабильной электронной системой. Работа получила широкую апробацию на российских и международных конференциях (11 докладов), опубликовано большое число статей, в том числе, в рейтинговых международных журналах.

Вопросы и замечания к тексту автореферата: использование NIST Chemistry Webbook в качестве источника экспериментальных данных может приводить к ошибкам, так как во многих случаях там содержатся наборы сильно различающихся данных и отсутствуют рекомендованные значения. Рассчитанные в работе энтальпии образования предполагают хорошую

согласованность с экспериментом, однако демонстрация удовлетворительной согласованности хотя бы для реперных структур помогло бы подтвердить надежность примененных методов и подходов.

Указанные замечания не снижают научную и практическую значимость диссертации Ахметшиной Е.С. и не влияют на ее высокую оценку в целом. Диссертационная работа посвящена актуальным проблемам, выполнена на высоком научном уровне, и полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (с последующими дополнениями), а сам диссертант, Ахметшина Екатерина Степановна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – «Физическая химия».

Профессор физической химии (Habilitation in „Physical Chemistry“, University of Rostock, 2001), кандидат химических наук (специальность - 02.00.04 - физическая химия), руководитель лаборатории "Перспективные технологии переработки возобновляемого органического сырья и аккумуляирования водорода" Самарского государственного технического университета.

Веревкин Сергей Петрович  
10.09.2024

*С.Вез*

«Самарский государственный технический университет» 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244, Тел. +7 937 210-48-22.  
E-mail: verevkin.sp@samgtu.ru

Подпись *Веревкин С.П.*  
удостоверяю, начальник управления  
по персоналу и делопроизводству ФГБОУ ВО «СамГТУ»  
Вусин С.Л. *Вусин С.Л.*

