

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

РХТУ.1.4.02 РХТУ им. Д.И. Менделеева
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от 10 сентября 2025 г. протокол № 2

О присуждении ученой степени кандидата химических наук Селивантьеву Юрию Михайловичу, представившему диссертационную работу на тему «Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов» по научной специальности 1.4.4 Физическая химия, принята к защите 26 июня 2025 года, протокол № 1 диссертационным советом РХТУ.1.4.02 РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Состав диссертационного совета утвержден в количестве 20 человек приказами и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева № 532 А от «30» декабря 2021 г., № 43 А от «13» марта 2024 г., № 246 А от «27» сентября 2024 г.

Соискатель Селивантьев Юрий Михайлович 1996 года рождения. В 2020 году с отличием окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кубанский государственный университет», диплом серия 102312 номер 0107084.

В 2024 году окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», свидетельство серия 107724 номер 0000006.

Соискатель работает ассистентом кафедры физической химии РХТУ им. Д.И. Менделеева, инженером-исследователем РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4 Физическая химия выполнена на кафедре физической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Тема диссертационной работы Селивантьева Юрия Михайловича и научный руководитель к.х.н., заведующий кафедрой физической химии, Райтман Олег Аркадьевич утверждены на заседании Ученого совета факультета естественных наук Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» от 13 мая 2024 года, протокол № 9.

Ведущая организация и официальные оппоненты:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»;

Доктор химических наук, доцент Щербakov Игорь Николаевич, заведующий кафедрой физической и коллоидной химии имени профессора В.А. Когана Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет»;

Кандидат химических наук, доцент Богданова Юлия Геннадьевна, старший научный сотрудник кафедры коллоидной химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 6 научных работах общим объемом 64 страницы, опубликованных в журналах, индексирующихся в WoS и Scopus (Q1-Q3)

Опубликовано 9 научных докладов на российских и международных конференциях.

Все работы опубликованы в соавторстве. Личный вклад автора составляет от 50 до 85%, заключается в непосредственном участии в планировании работ, проведении экспериментов, анализе и обсуждении полученных результатов, написании работ.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Ivanin S.N. Synthesis, study and molecular modeling of possible structures of the heteroligand complex of gadolinium stearate with acetylacetone / Ivanin S.N., Panyushkin V.T., Selivantsev Yu.M. [et. al.] // *Journal of Structural Chemistry*. – 2021. – Vol. 62, No. 1. – Pp. 23-32. – DOI:10.26902/JSC_id66700 (WoS и Scopus)
2. Chernysheva A.I. Degradable covalently-linked siloxane-phosphazene polymer for drug loading and releasing / Chernysheva A.I., Karpova E.A., Selivantsev Yu.M. [et. al.] // *Reactive and Functional Polymers*. – 2023. – Vol. 182. P. 105491. – DOI:10.1016/j.reactfunctpolym.2022.105491 (WoS и Scopus)
3. E.S. Uvarova, Three-component cascade reaction of 3-ketonitriles, 2-unsubstituted imidazole N -oxides, and aldehydes / Uvarova, A.V. Kutasevich, E.S., Yu.M. Selivantsev [et. al.] // *Organic and Biomolecular Chemistry*. – 2024. – Vol. 22, № 21. – P. 4297-4308. – DOI 10.1039/d4ob00353e (WoS и Scopus)
4. Alexandrova A.V. Structure affinity of the Langmuir monolayer and the corresponding Langmuir–Blodgett film revealed by X-ray techniques / Alexandrova A.V., Shcherbina M.A., Selivantsev Yu.M. [et. al.] // *Soft Matter*. – 2024. – Vol. 20, No. 43. – P. 8601-8609. – DOI: 10.1039/d4sm01050g (WoS и Scopus)
5. Selivantsev Yu.M.. Quantum-Chemical Modeling of Optical and Physicochemical Properties of Amphiphilic Spiropyranes / Selivantsev Yu. M., Morozov A. N., Zaichenko N. L. [et. al.] // *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*. – 2024. – Vol. 60, No. 1. – Pp. 110-123. – DOI: 10.1134/S2070205124701521 (WoS и Scopus)
6. Selivantsev Yu.M. Interaction of 2-unsubstituted imidazole N-oxides with electron-deficient olefins: a quantum chemical analysis / Selivantsev Yu.M., Mityanov V.S., Uvarova E.S. [et. al.] // *Russian Chemical Bulletin*. – 2024. – Vol. 73, No. 9. – Pp. 2593-2605. – DOI: 10.1007/s11172-024-4370-z (WoS и Scopus)

На диссертацию и автореферат поступили отзывы.

От ведущей организации:

ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина» (УрФУ). Отзыв положительный.

Вопросы и замечания по работе

1. В ходе выполнения работы было проведено изучение экспериментальных и смоделированных спектров поглощения для дифильных спиронафтоксазинов. Для оценки перспектив и возможностей применения рассматриваемых соединений в органической электронике важным представляется регистрация, моделирование и изучение спектров эмиссии в различных растворителях и твердом виде.
2. Для изучения фотофизических свойств дифильных спиропиранов запись спектров оптического поглощения проводили в органических растворителях (хлороформ, ацетон и ацетонитрил). Чем обусловлен выбор именно этих растворителей?
3. В рамках диссертационного исследования на основании данных квантово-химических расчетов получены ценные сведения о механизме и особенностях взаимодействия имидазол-N-оксидов с электронодефицитными олефинами в зависимости от наличия специфических функциональных групп. Было ли проведено сравнение расчетных результатов с экспериментальными данными по исследованию механизма химической реакции?
4. В работе проведено исследование реакционной способности и оценены возможности функционализации производных N-оксидов имидазолов под действием электронодефицитных олефинов. Какие структуры могут представлять наибольший интерес для дальнейшего изучения фармакологической активности?
5. В некоторых схемах и рисунках в автореферате и диссертации присутствуют

англоязычные термины и выражения («photochemical», «thermal», «transition to micelles», «inhibitor», «coumarin», «dark», «mol», «relative», «energy», «pathway», «isomerizations», «urea», «catalyst» и пр.), которые следовало бы заменить на русскоязычные аналоги. Также следует отметить замечание по рисунку 1.3.1 диссертации в части визуализации схемы протонирования имидазола. Замечены опечатки на стр. 57, 75, 83 диссертации. В схемах 3.3.2 и 3.3.3 диссертации / схемах 1 и 2 автореферата некорректное написание числовых значений величин.

Общее заключение и оценка представленной диссертационной работы

Отмеченные замечания не снижают общую положительную оценку диссертационной работы, вопросы во многом носят дискуссионный характер. Диссертационная работа Селивантеева Юрия Михайловича отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД, а ее автор, Селивантеев Юрий Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4 – Физическая химия (химические науки).

От официальных оппонентов:

1. Доктор химических наук, доцент Щербаков Игорь Николаевич, заведующий кафедрой физической и коллоидной химии имени профессора В.А. Когана Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет». Отзыв положительный.

Вопросы и замечания по работе

1. При квантовохимическом моделировании большое (во многом определяющее успех работы и достоверность полученных результатов) значение имеет выбор расчетного метода (приближение, базисный набор, в случае DFT – применяемый функционал, методы расчета свойств). В работе уделено мало внимания обоснованию выбранных методов расчета, причем для разных семейств соединений (СП, СНО, N-ОИ) при этом используются совершенно разные DFT функционалы в сочетании с различными базисными наборами. Чем обусловлен разнородный выбор методов и как обеспечивается сопоставимость результатов?

2. На стр. 68 в табл. 3.1.2 приведены вычисленные и скорректированные положения длинноволновой полосы поглощения изомеров соединения СП1 в различных растворителях. В тексте указано, что для коррекции использовалось уравнение регрессии из источника 27 (M. Guillaume et al, 2006). Однако, в этой работе было получено несколько регрессионных уравнений. Какое из них использовалось для расчетов и почему? Почему не использовалось полученное далее в рамках работы регрессионное уравнение для СП1-СП3? В чем разница между $\lambda_{\text{рег}}$ (стр.82) и $\lambda_{\text{сог}}$ (стр.76), $\lambda_{\text{мах}}$ (стр.80)?

3. Для предложенных регрессионных зависимостей коррекции вычисленной длины волны полосы поглощения не приведены данные статистической обработки, не указан объем выборки для их получения, среднеквадратичные отклонения для регрессионных коэффициентов. Указание коэффициентов с точностью до 5–6 значащих цифр представляется избыточным и необоснованным без соответствующей статистики.

4. Приведенные на рисунок 3.2.4 экспериментальные ЭСП соединений СНО1-5 характеризуются интенсивным поглощением в области 600 нм, что однозначно свидетельствует о наличии мероцианиновых изомеров в растворах соединений, что противоречит предсказанию относительной устойчивости Спиро_{trans} изомера для всех соединений и растворителей. Необходимо дать объяснение этому расхождению.

5. Неясно, чем обусловлен выбор соединений Им2–Им5 для исследования их взаимодействия с Им1. Требуется пояснение критериев отбора этих субстратов.

6. Вывод под номером три о возможности существования конических пересечений поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) основного и возбужденного электронных состояний выглядит малообоснованным, так как расчетов на ППЭ

возбужденных состояний в работе не проводилось. Такие утверждения требуют либо дополнительных расчетов, либо более осторожной формулировки.

7. В работе имеется ряд опечаток и орфографических ошибок, не везде расшифрованы используемые краткие обозначения. В некоторых случаях используются двойные обозначения рассматриваемых соединений, например, СП1-СП3 на рисунках и в некоторых местах в тексте дополнительно обозначены как I-III. Есть примеры использования неудачных терминов и выражений: Термин «отрицательные спиропираны» (раздел 3.1.2) не является общепринятым. Вероятно, имелся в виду «отрицательный фотохромизм»; «...комбинаций двух типов электроноакцепторных заместителей – нитрилов и кетонов» (стр. 7); нитрилы и кетоны – это классы органических соединений, а не заместители; «...многоконфигурационному детерминанту...» (стр.32); «При облучении закрытый бензопиран начинает движение вдоль пути поверхности потенциальной энергии». (Стр 45) «...растяжения Сспиро–О связи под действием ультрафиолетового света», «...конические пересечения возбужденного и основного электронных состояний» (стр.89) «...атомы С(2) во всех олефинах имеют повышенную электронную плотность в LUMO орбиталях» (стр. 101) «поверхность потенциальной энергии не имеет перегибов и монотонно увеличивается» (стр. 102).

Общее заключение и оценка представленной диссертационной работы

Тем не менее, несмотря на указанные недостатки, диссертационная работа Селивантьева Ю. М. оформлена по рекомендованным правилам и выполнена на высоком профессиональном уровне, является законченным и актуальным научным исследованием. Диссертационная работа Селивантьева Юрия Михайловича отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД. Автор диссертации, Селивантьев Юрий Михайлович, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

2. Кандидат химических наук, доцент Богданова Юлия Геннадьевна, старший научный сотрудник кафедры коллоидной химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». Отзыв положительный.

Вопросы и замечания по работе

1. Несмотря на то, что в заключении представлены основные выводы работы, для облегчения восприятия материала работы и систематизации ее результатов явно не хватило краткого резюме по каждой главе части «Обсуждение результатов».

2. На стр. 69 приведено утверждение, что была проведена оценка влияния гидрофильно-липофильного баланса (ГЛБ) молекулы типа СП1, содержащей углеводородные радикалы различной длины, на ее спектральные характеристики. Однако ГЛБ (который представляет собой число) в работе рассчитан или экспериментально определен не был. Считаю, что данный термин использовать в этом случае не было необходимости.

3. Таблицы 3.2.2 и 3.2.3 (данные об экспериментальных и расчетных длинах волн полос поглощения дифильных спиронафтооксазинов) следовало бы объединить для наглядности вывода об удовлетворительной предсказательной точности расчетных методов квантовой химии, примененных в работе. При этом не лишне было бы еще раз указать точность расчета.

4. Во введении и литературном обзоре поставлен акцент на применение спиросоединений в виде двумерных ансамблей молекул. Однако никаких экспериментов, которые позволили бы связать устойчивость конформаций различных форм молекул или учесть влияние растворителя, из которого формируются монослои Ленгмюра на поверхности водной субфазы, на свойства этих монослоев, в работе проведено не было. Равно как не было

проведено экспериментов по формированию слоев Ленгмюра-Блоджетт и изучению их свойств. Возможно, в работе стоило бы ограничиться исследованием спиросоединений в качестве объектов исследования, но провести более обстоятельные экспериментальные исследования, поскольку при формулировке актуальности темы работы упоминается использование ЛБ-технологий.

5. Квантово-химические расчеты хороши и полезны, когда их корректность хоть в какой-то мере подтверждена экспериментально. При анализе влияния природы электроноакцепторной группы олефина на механизм реакций с N-оксидами 2-незамещенных имидазолов автору было бы полезно именно в третьей главе части «Обсуждение результатов» привести ссылки на публикации (если таковые имеются), в которых описаны реакции конкретных веществ, реализующиеся по тому или иному механизму. В обзоре литературы дан анализ таких работ, но реакции приведены только в общем виде.

6. В подглавах автореферата «Апробация работы», «Публикации» и списке публикаций автора по результатам диссертации необходимо было провести более четкое разграничение статей и материалов докладов. Остается только догадываться, что на 7 конференциях, указанных в части «Апробация работы» были предоставлены результаты, изложенные в 6 тезисах и 3 статьях в журнале «Успехи в химии и химической технологии».

Общее заключение и оценка представленной диссертационной работы

Диссертационная работа Селивантьева Юрия Михайловича отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД. Считаю, что автор диссертации Юрий Михайлович Селивантьев заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 «Физическая химия».

Отзывы на автореферат.

1. Отзыв доктора химических наук, профессора **Колкера Аркадия Михайловича**, главного научного сотрудника Института химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук. Отзыв положительный.

Вопросы и замечания

1. Для зависимостей на стр. 11-12 не указаны параметры корреляции: такие как среднеквадратичное отклонение, коэффициент корреляции. Так же необходимо указать погрешности в коэффициентах приведенных уравнений.

2. Не понятен смысл последнего предложения на странице 10.

3. Связи C1-C2; C2-C3; C3-C4 (рис. 1) с большой вероятностью образуют сопряженную систему и вращение вокруг этих связей затруднено, наверное, более правильно называть эти структуры не конформерами, а изомерами, переключение между которыми может происходить под действием фотонов.

На основании представленного автореферата можно сделать вывод, что диссертационная работа Селивантьева Юрия Михайловича соответствует критериям п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 года, предъявленным к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

2. Отзыв доктора химических наук, профессора **Букова Николая Николаевича**, профессора кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии факультета химии и ВТ Кубанского государственного университета. Отзыв положительный.

Вопросы и замечания

1. Превышение рекомендуемого объема для авторефератов кандидатской диссертации за счет использования мелкого шрифта и одинарного междустрочного интервала. Рисунки и таблицы не всегда обособлены абзацами, что приводит к неудобствам при прочтении текста автореферата.

2. Присутствуют нерасшифрованные аббревиатуры методов расчета, что так же затрудняет чтение текста.

3. Приведение максимумов полос поглощения без указания молярной экстинкции не позволяет однозначно судить о типе электронного перехода.

4. Практическая значимость результатов исследования отражена в автореферате декларативно без указания конкретных решений.

Общее заключение и оценка представленной диссертационной работы

Несмотря на сделанные замечания, считаю, что Диссертация Селивантьева Ю.М. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, соответствующую требованиям, предъявляемым Положением о порядке присуждения ученых степеней к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

3. Отзыв кандидата химических наук **Дудкина Семена Валентиновича**, старшего научного сотрудника лаборатории борорганических соединений Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН. Отзыв положительный.

Вопросы и замечания

1. Отсутствует расшифровки аббревиатур «CASSCF» (стр. 2) и «EWG» (стр. 14);

2. В тексте автореферата, к сожалению, отсутствует объяснение выбора растворителей для регистрации электронных спектров поглощения, рассматриваемых в работе спиропиранов и спиронафтоксазинов (см. табл. 1-3)

3. В работе использовано несколько неудачных выражений: «н-бутильное производное» (стр. 8), «длинноцепочечный спиропиран» (стр. 17)

Указанные замечания не являются критическими. Диссертация Селивантьева Ю.М. соответствует требованиям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», утвержденным приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. №103 ОД. Считаю, что автор диссертационной работы заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

4. Отзыв кандидата химических наук **Ельцова Ильи Владимировича**, доцента кафедры общей химии факультета естественных наук Новосибирского государственного университета. Отзыв положительный.

Вопросы и замечания

1. На стр. 6. автор говорит о том, что в мероциановой форме «возможно существование как минимум восьми конформаций». Хотелось бы обратить внимание, что число конформаций в данном случае стремится к бесконечности, потому что проворот вокруг одной связи даже на 1° дает нам новый ротомер с уже другой энергетической структурой. Просто автор для своей работы выбрал конкретные ротомерные структуры, судя по всему, плоского строения. Почему именно их – в тексте автореферата не поясняется;

2. В дальнейшем на той же странице говорится о гипсохромном сдвиге в УФ-спектре в зависимости от растворителя. Однако в тексте не поясняется, какой именно переход в данном случае реализуется. Только дочитав до стр.10 по косвенным признакам можно предполагать, что автор рассуждает о $\pi \rightarrow \pi^*$ переходе. Однако стоит заметить, что в сопряженной системе присутствует атом кислорода с неподеленной парой, который может давать и $n \rightarrow \pi^*$ переход. Более того, именно для $n \rightarrow \pi^*$ переходов характерен гипсохромный сдвиг при увеличении полярности растворителя.

3. Более того, если внимательно взглянуть на экспериментальные полосы поглощения, то можно заметить их несимметричную форму. Таким образом, данные сигналы представляют собой комбинацию минимум двух отдельных лоренцевых линий. Проводилась ли деконволюция и последующий анализ этих сигналов? Возможно, в реальном спектре мы как раз и наблюдаем сигналы от двух ротомеров? Это позволило бы более точно подобрать модель расчетов.

Данные замечания не затрагивают выносимых на защиту положений настоящей работы. Представленная к защите диссертация Селивантьева Ю.М. отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД. Считаю, что автор диссертации Селивантьев Юрий Михайлович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 «Физическая химия».

5. Отзыв доктора химических наук, профессора Арсланова Владимира Валентиновича, главного научного сотрудника лаборатории физической химии супрамолекулярных систем Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН. Отзыв положительный.

Вопросы и замечания

Работа не имеет существенных недостатков. Тем не менее, возникает вопрос о связи полученных результатов с организованными системами, которым отведено значительное место во введении. Хорошо известно, что свойства дифильных молекул (например, спектральные характеристики), упорядоченных на подложках (монослой Ленгмюра и ЛБ-пленки) или в дисперсиях (мицеллы, везикулы и др.) могут значительно отличаться от свойств в растворе. Понятно, что решение этой задачи методами квантовой механики весьма затруднительно. Однако какие-либо прогностические представления следовало бы высказать.

Диссертация Селивантьева Ю.М. отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. №103 ОД. Считаю, что автор диссертации Селивантьев Юрий Михайлович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия»

6. Отзыв кандидата биологических наук, Лысенковой Людмилы Николаевны, старшего научного сотрудника лаборатории химической трансформации антибиотиков Научно-исследовательского института по изысканию новых антибиотиков им. Г.Ф. Гаузе. Отзыв положительный.

Замечаний нет. Диссертация Селивантьева Ю.М. отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. №103 ОД. Считаю, что автор диссертации Селивантьев Юрий Михайлович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия»

7. Отзыв доктора химических наук, профессора РАН Вацадзе Сергея Зурабовича, заведующего лабораторией супрамолекулярной химии Института органической химии им. Н.Д. Зеленского РАН. Отзыв положительный.

Замечаний нет. Диссертация Селивантьева Ю.М. отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. №103 ОД. Считаю, что автор диссертации Селивантьев Юрий Михайлович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия»

На все замечания Селивантьев Юрий Михайлович дал полные и исчерпывающие ответы.

Выбор официальных оппонентов обосновывается компетентностью, достижениями в научных исследованиях с близкой тематикой, наличием у оппонентов публикаций в рецензируемых журналах и их высоким профессиональным уровнем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

показано, что выявление корреляций между расчетными и экспериментальными данными позволяет устанавливать шкалирующие регрессии, предсказывающие оптические свойства новых дифильных спиросоединений;

обобщены методики предсказания оптических характеристик новых спиросоединений с различными заместителями в органических растворителях

Методами квантовой химии **установлены** возможные пути реакции N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами с учетом различных комбинаций двух типов электроноакцепторных заместителей – нитрилов и кетонов. На основании проведенных расчетов дано объяснение избирательности механизма реакции в зависимости от заместителей.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

получены линейные регрессии для дифильных спиропиранов и спиронафтоксазинов, учитывающие набор физических параметров растворителя в явном виде и позволяющие предсказывать оптические спектры таких соединений;

рассчитаны структурные, энергетические и спектральные характеристики ряда спиропиранов и спиронафтоксазинов в различных растворителях методом теории функционала плотности, а также многоконфигурационным методом CASSCF;

определены структурные параметры и относительные энергетические характеристики всех интермедиатов и переходных состояний в механизмах взаимодействия N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами;

показана принципиальная возможность использования многоконфигурационного метода CASSCF без учёта эмпирических данных для моделирования оптических спектров любых производных фотохромов спиронафтоксазинового класса с высоким соответствием экспериментальным данным на активном пространстве небольшого размера;

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

предложены методики эмпирической корректировки рассчитанных положений оптической полосы электронного спектра для дифильных спиропиранов и спиронафтоксазинов, позволяющие предсказывать оптические характеристики таких соединений с различными заместителями в ряде органических растворителей;

опробована методика неэмпирического расчета электронных переходов спиронафтоксазинов в мероцианиновой форме методом CASSCF, позволяющая предсказывать оптические полосы этих соединений с высокой точностью;

получено обоснование различия механизмов взаимодействия N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами в зависимости от возможности внутри- или межмолекулярного переноса протона с имидазольного фрагмента на акцептор. На основании данных об энергетических барьерах прямых и обратных реакций дано объяснение необратимому характеру этих превращений.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

достоверность обеспечивалась за счет использования сертифицированного научного оборудования и применения современных квантово-химических и физико-химических методов исследования. Полученные данные воспроизводимы и сопоставимы с литературными источниками;

теория основана на известных и достоверных фактах; согласуется с опубликованными экспериментальными данными по теме диссертации в области исследования фотохромных спиросоединений и синтеза новых производных имидазолов;

идеи базируются на анализе полученных (проверенных и воспроизводимых)

экспериментальных и расчетных данных, сопоставленных с опубликованными в литературе сведениями по исследуемой тематике для других сложных органических красителей и моделировании путей реакции органических соединений;

установлено отсутствие противоречия полученных результатов с данными, опубликованными в работах отечественных и зарубежных авторов;

использованы общепринятые методики проведения квантово-химического моделирования и статистической обработки экспериментальных данных.

Выводы диссертации обоснованы, не вызывают сомнений и согласуются с современными представлениями о структуре, электронном строении, оптических и физико-химических свойствах спиросоединений, а также реакционной способности N-оксидов имидазолов.

Личный вклад соискателя состоит в разработке и планировании исследования, постановке цели и задач (совместно с научным руководителем), выборе подходов к их решению, разработке методик эксперимента, выполнении экспериментов, анализе результатов и их обобщении, а также в личном участии в апробации результатов исследования и подготовке публикаций.

По своему содержанию диссертационная работа Селивантьева Ю.М. «Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов» соответствует паспорту специальности научных работников 1.4.4 Физическая химия по п.1 «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик», п. 9. «Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции», а также п.11 «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении».

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой решена актуальная задача предиктивного моделирования физико-химических, оптических свойств и реакционной способности дифильных спиросоединений и N-оксидов имидазолов.

По актуальности, новизне, практической значимости диссертация соответствует требованиям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденным приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева № 103 ОД от 14.09.2023 г.

На заседании диссертационного совета РХТУ.1.4.02 РХТУ им. Д.И. Менделеева 10 сентября 2025 года принято решение о присуждении ученой степени кандидата химических наук Селивантьеву Юрию Михайловичу.

Присутствовало на заседании 16 членов диссертационного совета,
в том числе в режиме видеоконференции 2,

в том числе докторов наук по научной специальности, отрасли науки рассматриваемой диссертации 5.

При проведении голосования члены диссертационного совета по вопросу присуждения ученой степени проголосовали.

Результаты тайного голосования:

«за» - 14,

«против» - нет,

«воздержались» - нет.

Проголосовали 2 членов диссертационного совета, присутствовавшие на заседании в режиме видеоконференции

«за» - 2,

«против» - нет,

«воздержались» - нет.

Итоги голосования:

«за» - 16,

«против» - нет,

«воздержались» - нет.

Председатель
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета

Дата «10» сентября 2025 г



д.х.н., проф. Назаров В.В.

д.х.н., доц. Мурашова Н.М.