

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации
Селивантьева Юрия Михайловича,

представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. «Физическая химия» на тему
«Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной
способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов»

В последние десятилетия мы можем наблюдать всё более активную интеграцию современной синтетической химии и компьютерных технологий. Обработка массивов структурных данных, оптимизация геометрии, построение всевозможных корреляций, расчёт термодинамических параметров, наконец, рисование картинок для публикаций и докладов на конференциях - это только самый поверхностный список того, что дают современные информационные технологии обычному химику. Буквально в последние годы в химию начинают активно внедряться нейросети и искусственный интеллект. Настоящая диссертационная работа, представленная Селивантьевым Юрием Михайловичем, вполне вписывается в эту тенденцию, т.е. является вполне современной и актуальной. А поскольку она непосредственно завязана на спиросоединения, являющиеся фотоактивными материалами, то она еще имеет и практическое значение. В своей работе Юрий Михайлович попытался разработать квантово-химические подходы по предсказанию спектральных характеристик соединений. Сама по себе эта задача чрезвычайно важная и полезная, призванная в значительной степени сэкономить и финансовые, и временные затраты на разработку новых материалов. С учетом того, что им использованы современные подходы к квантово-химическому моделированию с опорой на реальные экспериментальные данные, а также тот факт, что данные результаты были апробированы на различных конференциях и вылились в публикации в достойных рецензируемых научных журналах, достоверность полученных результатов сомнений не вызывает. Стоит также отметить, что количество и уровень публикаций соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Содержание автореферата позволяет составить общее представление об основном содержании самой диссертационной работы, однако для полноценного понимания самого текста в самом начале надо приложить определенные усилия, дабы овладеть терминологией соискателя. К сожалению, в автореферате, на мой взгляд, не хватает

достаточного количества иллюстративного материала для более легкого восприятия текста. В целом, никаких существенных нареканий по основной сути работы автореферат не вызвал. Тем не менее, он всё же породил ряд вопросов и замечаний, которые я позволю себе в дальнейшем изложить:

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. После ознакомления с данным трудом не остается никаких сомнений, что 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».

27.08.2025

Доцент кафедры общей химии Факультета естественных наук
Новосибирского государственного университета
Кандидат химических наук по специальности 02.00.01 – «неорганическая химия»
Доцент по кафедре общей химии

Ельцов Илья Владимирович

e-mail: eiv@fen.nsu.ru

раб.тел. +7 383 363 41 99

моб. тел. +7 [] 8

Ученый секретарь

Новосибирского государственного университета

к.х.н. Тарабан Е.А.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»

ул. Пирогова, д. 2, Новосибирск, 630090.

Тел. (383) 330-32-44. Факс (383) 330-32-55.

Адрес в интернете: //www.nsu.ru

E-mail: rector@nsu.ru

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.