

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертационной работы Селивантьева Юрия Михайловича
«Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной
способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности**

1.4.4 Физическая химия

Предсказание поведения молекул сложных органических веществ, обладающих различными ценными практическими свойствами, и сопоставление расчётных данных с экспериментально наблюдаемыми фотофизическим, а главное, оптическим свойствами этих соединений является важной научной задачей, стоящей перед исследователями.

Очевидно, что одним из путей решения этой задачи является совместное использование квантово-химических и вычислительных методов для создания моделей, объясняющих спектральные свойства сложных органических молекул. Одним из наиболее распространённых квантово-химических методов является теория функционала плотности, однако, использование этого метода для предсказания положения максимума основной полосы поглощения сложных органических молекул даёт не всегда удовлетворительные результаты. Таким образом, разработка комбинированных методик расчета спектральных характеристик сложных органических молекул, оценка влияния заместителя в такой молекуле на оптические свойства, сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными, а также построение новых моделей для предсказания свойств сложных органических молекул является интересной и важной задачей.

В рамках представленной соискателем работы успешно решен ряд задач: впервые смоделированы оптические свойства дифильных спиросоединений в закрытом и открытом состояниях и показано влияние протяженных алифатических заместителей на структуру и электронное строение этих соединений; рассчитаны энергетические уровни различных конформаций этих фотохромов, определена относительная устойчивость их циклических и мероцианиновых форм, показана принципиальная возможность теоретического обоснования отрицательного фотохромизма у рассматриваемых спиропиранов; установлены корреляции между расчетными и экспериментальными данными, на основании которых предложены шкалирующие регрессии, позволяющие достаточно хорошо предсказывать оптические свойства новых дифильных спиросоединений; предложено квантово-химическое обоснование избирательной реакционной способности имидазол N-оксидов с электронодефицитными олефинами и показаны возможные пути реакции с учетом различных комбинаций двух типов электроноакцепторных заместителей – нитрилов и кетонов; предложено объяснение избирательности механизма этой реакции в зависимости от заместителей.

Всё это говорит о том, выбор темы представленной работы является *актуальным*, а задачи, поставленные в работе, *значимыми*.

Следует отметить, что работа выполнена на высоком научном уровне.

Основные результаты работы доложены на профильных конференциях и опубликованы в ведущих профильных научных журналах, входящих в рекомендованный ВАК список.

Достоверность представленных результатов не вызывает сомнений.

По автореферату имеются следующие замечания:

- Отсутствует расшифровки аббревиатур «CASSCF» (стр. 2) и «EWG» (стр. 14);
- в тексте автореферата, к сожалению, отсутствует объяснение выбора растворителей для регистрации электронных спектров поглощения

рассматриваемых в работе спиропиранов и спиронафтоксазинов (см. табл. 1 – 3);

- в работе использовано несколько неудачных выражений: «*n*-бутильное производное» (стр. 8) и «длинноцепочечных спиропиранов» (стр. 17).

Указанные замечания не являются критическими и не снижают общее впечатление от выполненной работы.

В целом, автореферат диссертационной работы Селивантьева Ю.М. свидетельствует о том, что по своей актуальности, содержанию и уровню полученных результатов, их новизне и значимости диссертация соответствует требованиям, установленным Положением о порядке присуждения учёных степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утверждённым приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. №103 ОД.

Считаю, что автор диссертационной работы – Селивантьев Юрий Михайлович – заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Старший научный сотрудник лаборатории
алифатических борорганических соединений
ФГБУН Институт элементоорганических
соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
кандидат химических наук
(02.00.03 – органическая химия)

119334, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр.1
e-mail: sdudkin@ineos.ac.ru

Дудкин Семён Валентинович

25.08.2025.

Подпись С.В. Дудкина заверяю:
Учёный секретарь ФГБУН ИНЭОС РАН,
кандидат химических наук

Гулакова Елена Николаевна