

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Селивантьева Юрия Михайловича «Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной способности дифильных гетероциклических спирособъединений и имидазолов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 «Физическая химия»

Диссертационная работа Селивантьева Ю. М. посвящена разработке моделей для прогнозирования оптических и термодинамических свойств, а также структурных и реакционной способности спиро- и имидазольных гетероциклов, теоретическому изучению пространственного и электронного строения дифильных спироциклических фотохромов. Кроме того, рассмотрены пути реакции N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами.

Актуальность настоящего исследования состоит в построении новых моделей для предсказания свойств важного класса органических веществ - дифильных спирособъединений. Это относится к разработке комбинированных методик расчета спектральных характеристик, оценке влияния длины алифатической цепи в молекуле фотохрома на его оптические свойства, к сравнению полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными. Теоретическое описание путей и механизмов реакции N-оксидов имидазолов также является важной и актуальной задачей современной органической химии в связи с их широким применением в медицине, агрономии, синтезе различных красителей.

К наиболее оригинальным и существенным результатам, следует отнести, прежде всего, данные о моделировании оптических и термодинамических свойств дифильных спирособъединений в закрытом и открытом состояниях, а также анализ влияния длинных алифатических цепей на молекулярную структуру и электронное строение. Представляют новизну результаты по теоретическому определению энергетических уровней различных конформаций исследованных фотохромов, а также по оценке относительной устойчивости их циклических и мероцианиновых форм.

Вызывает значительный интерес демонстрация принципиальной возможности теоретического обоснования отрицательного фотохромизма у некоторых спиропиранов. Результаты, полученные в диссертационной работе Селивантьева Ю. М., являются основой для разработки базового концепта, учитывающего влияние растворителя на спектральные свойства спирособъединений, и построения единой регрессионной модели, охватывающей различные проявления сольвато- и фотохромизма. Оптимальное сочетание квантово-химических методов расчета спектральных характеристик позволяет разрабатывать новые предсказательные модели для прогнозирования свойств светочувствительных органических соединений и реакционной способности гетероциклов.

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.

Это замечание не умаляет достоинств настоящей работы, которая представляет серьезный научный интерес. Публикации по теме диссертации в полной мере отражают содержание работы и основные защищаемые положения.

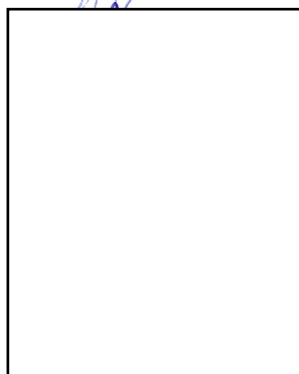
Диссертация Селивантьева Ю.М. отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. 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».

Главный научный сотрудник
лаборатории физической химии
супрамолекулярных систем Института
физической химии и электрохимии РАН,
доктор химических наук, профессор

Подпись руки В.В. Арсланова
Заверяю
Ученый секретарь ИФХЭ РАН
кхн Варшавская И.Г.

В.В. Арсланов



04.09.2025

Автор отзыва: доктор химических наук, профессор Владимир Валентинович Арсланов.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук.

119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4.