

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Селивантьева Юрия Михайловича «Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4.

Физическая химия

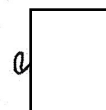
Наноразмерные оптически активные объекты на межфазных границах являются основой при разработке технологий молекулярной электроники, химических и биохимических сенсоров, устройств оптической памяти и т.п. Понимание связи между структурой органических молекул и их оптическими свойствами позволяет ученым целенаправленно разрабатывать и синтезировать новые фотохромные соединения с заданными характеристиками, что критически важно для создания новых технологий и материалов. Методы квантовой химии позволяют на теоретическом уровне определить электронные переходы и спектральные характеристики fotocувствительных молекул, механизмы их фотоиндуцированной изомеризации, а также реакционную способность органических соединений. В связи с этим исследования, проведенные в диссертационной работе Селивантьева Ю.М., посвященной прогнозированию фотофизических и физико-химических свойств дифильных спиросоединений, безусловно являются актуальными. Впервые были смоделированы оптические и термодинамические свойства длинноцепочечных спиропиранов и спиронафтоксазинов в закрытом и открытом состояниях, рассмотрено влияние алифатических заместителей на их структуру и электронное строение. Рассчитаны энергетические уровни различных конформаций этих фотохромов, определена относительная устойчивость их циклических и мероцианиновых форм, показана принципиальная возможность теоретического обоснования обратного фотохромизма у некоторых спиропиранов. Предложены шкалирующие регрессии, позволяющие с высокой точностью прогнозировать оптические свойства новых дифильных спиросоединений. Автором впервые дано квантово-химическое обоснование избирательной реакционной способности N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами и полностью просчитаны возможные пути реакции с учетом различных комбинаций двух типов электроноакцепторных заместителей – нитрилов и кетонов. Эти и другие данные составляют научную новизну работы. Публикация результатов исследований в ведущих зарубежных и отечественных профильных изданиях подтверждает высокую достоверность полученных автором данных.

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».

Кандидат биологических наук, с.н.с.
ФГБНУ "Научно-исследовательский
институт по изысканию новых
антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе"



Л.Н. Лысенкова

Контактные данные:

Тел.: 8 (499)245-37-53

Е-mail: lyudmil-lys@yandex.ru

Адрес: 119021, Москва, ул. Большая Пироговская, дом 11, строение 1,
Лаборатория химической трансформации антибиотиков,
Федеральное государственное бюджетное научное учреждение "Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе".

Подпись к.б.н. с.н.с. Лысенковой Л.Н. удостоверяю
Ученый секретарь к.х.н.

ФГБНУ Научно-исследовательский институт
по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе
е-mail. instna@mail.ru



Кисиль О.В.



Дата составления отзыва: 05.09.2025 г.

Автор отзыва: Лысенкова Людмила Николаевна.