

ОТЗЫВ

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

Одно из динамично развивающихся направлений современной химии связано с исследованием гетероциклических органических соединений и их производных. Особо это относится к спирособединениям и производным имидазола, которые очень перспективны для создания компонентов различных фотоэлектронных устройств, лекарственных соединений, ингибиторов коррозии и т.д. Для таких практически полезных веществ очень важно развитие и применение молекулярного моделирования численными методами квантовой химии, которое дает возможность надежно спрогнозировать свойства соединений при их структурной перестройке, что в свою очередь даст возможность получить вещества с необходимым набором функциональных свойств, значительно сократив экспериментальные и временные затраты. В связи с этим работа Селивантьева Ю.М., посвященная разработке предсказательных моделей на основе подходов квантовой химии для расчета спектральных характеристик, пространственного строения, устойчивости и реакционной способности практически важных гетероциклических органических соединений является актуальным научным исследованием.

Автор успешно решил поставленные задачи: впервые получил модели оптических свойств дифильных спирособединений в открытом и закрытом состоянии; для этих же соединений построил шкалирующие регрессии для расчетных спектральных характеристик; впервые получил квантово-химическое обоснование избирательной реакционной способности N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами; на основе расчетов показал возможные пути вышеупомянутого процесса с учетом различных комбинаций электроноакцепторных заместителей (нитрилов и кетонов) и дал объяснение избирательности механизма в зависимости от природы заместителя. Такие результаты, особенно данные о спектральных характеристиках спирособединений и производных имидазола в сопоставлении с экспериментом, данные о структурной модификации, несомненно могут быть использованы при регулировании оптических и энергетических свойств данных соединений, что открывает широкие возможности их практического применения.

Выводы по работе в целом обоснованы и полностью отражают результаты выполненного исследования.

Основные результаты диссертации опубликованы в шести статьях в ведущих научных журналах, индексируемых в международных базах. Кроме того, работа прошла апробацию на многочисленных международных и всероссийских конференциях. Все публикации соответствуют тематике исследования.

Имеются замечания по автореферату:

1. Для зависимостей на стр. 11-12 не указаны параметры корреляции: такие как среднеквадратичное отклонение, коэффициент корреляции. Также необходимо указать погрешности в коэффициентах приведенных уравнений.
2. Не понятен смысл последнего предложения на стр. 10.
3. Связи C1 – C2; C2 – C3; C3 – C4 (рис. 1) с большой вероятностью образуют сопряженную систему и вращение вокруг этих связей затруднено, наверно более

правильно называть эти структуры не конформерами, а изомерами, переключение между которыми может происходить под действием фотонов.

В целом следует дать высокую оценку диссертационной работе, которая выполнена на должном экспериментальном и теоретическом уровне и представляется очень интересной.

На основании представленного автореферата можно сделать вывод, что диссертационная работа Селивантьева Юрия Михайловича «Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов» по актуальности, научной новизне и практической значимости, обоснованности научных положений и выводов, полноте опубликования материала соответствует критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 года (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Селивантьев Юрий Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Главный научный сотрудник, руководитель группы «Структура и динамика молекулярных и ион-молекулярных систем» доктор химических наук, профессор; тел. +7(4932)351679; E-mail: amk@isc-ras.ru
01.09.2025 г.



Научный сотрудник отдела «Мультимасштабное моделирование молекулярных жидкостей и растворов», кандидат химических наук;
тел.+7(4932) 336257; E-mail: mak1111@bk.ru
01.09.2025 г.

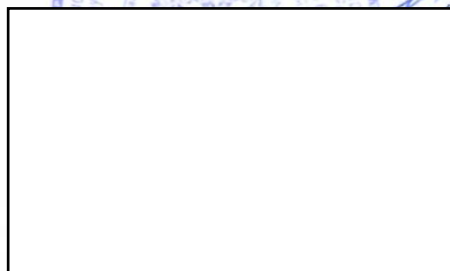
Крестьянинов Михаил Алексеевич



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН)
153045, г. Иваново, ул. Академическая, 1. Тел./факс (4932) 336259 / 336265; E-mail: adm@isc-ras.ru, <http://www.isc-ras.ru>

Подписи Колкера А.М. и Крестьянинова М.А. заверяю:

Ученый секретарь ИХР РАН



к.х.н. Иванов К.В.