

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 научной специальности 1.4.4.

Физическая химия

Диссертационная работа Селивантьева Ю.М. посвящена квантово-химическому моделированию физико-химических свойств и реакционной способности некоторых гетероциклических систем, находящихся широкое применение в различных областях науки, промышленности, медицины, здравоохранения. Действительно, высокий интерес к спиросоединениям и производным имидазолов обусловлен их активным использованием в качестве фотопереклюкателей, оптических логических устройств, систем хранения и преобразования данных и т.п., в связи с чем *актуальность* представляемой к защите работы сомнений не вызывает. Особое внимание ученых привлекает возможность предсказания физико-химических, оптических, фотофизических свойств, а также химического поведения соединений этих классов.

Автором диссертации впервые показана возможность использования TD-DFT для предсказания оптических характеристик амфифильных спиропиранов; это позволило унифицировать эмпирическую корректировку, учитывающую сольватохромный эффект. Для спиропиранов обнаружена возможность существования конических пересечений поверхностей потенциальной энергии основного и возбужденного электронных состояний. Впервые на основании квантово-химических расчетов дана детализация механизмов взаимодействия N-оксидов имидазолов с электронодефицитными олефинами.

Таким образом, разработанные в диссертационной работе комбинированные методики расчета спектральных характеристик для дифильных спиросоединений, позволяющие оценивать влияние природы и положения заместителей в молекуле фотохрома на его оптические свойства, а также проведенные сравнения полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными, обладают высокой *научной новизной*. Способность с высокой степенью точности теоретически обосновывать функциональные характеристики большого количества гетероциклических молекул на основании предложенных квантово-химических моделей позволяет осуществлять направленный синтез целевых соединений и

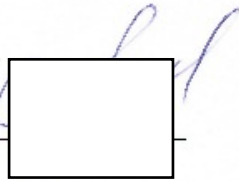
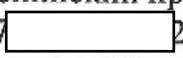
обеспечивает теоретическую и практическую значимость проведенных исследований.

К безусловным положительным достижениям работы можно отнести расчеты электронно-возбужденных состояний органических молекул и предсказание энергий электронных переходов.

Достоверность полученных автором данных подтверждается широкой апробацией результатов на российских и зарубежных конференциях различного уровня, публикацией статей в ведущих международных и отечественных журналах по данному направлению.

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».

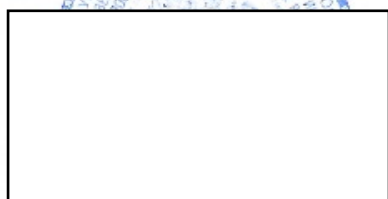
Считаю, что автор диссертации Селивантьев Юрий Михайлович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 «Физическая химия».

Вацадзе Сергей Зурабович,
доктор химических наук (02.00.03 органическая химия), 
Профессор РАН
Заведующий лабораторией супрамолекулярной химии
ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской
академии наук (ИОХ РАН)
119991 г. Москва,
Ленинский просп., 47
+7 
vatsadze@ioc.ac.ru

Согласен на обработку персональных данных.

Подпись Вацадзе С.З. заверяю:

Ученый секретарь ИОХ РАН, к.х.н.



Коршевец И.К.

01.09.2025 г.