

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Селевантьева Юрия Михайловича на тему "Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств и реакционной способности дифильных гетероциклических спиросоединений и имидазолов", представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности: 1.4.4 – физическая химия.

Интерес к спиросоединениям и производным имидазолов, на сегодняшний день определяется их широким применением в качестве рабочих элементов фотопереклюателей, оптических логических устройств, систем хранения данных, оптоэлектронных преобразователей, а также основных компонентов противоопухолевых препаратов и антикоррозионных агентов. При этом актуальными задачами являются прогнозирование поведения данных гетероциклических молекул с учетом их структуры, сравнение рассчитанных характеристик с экспериментально полученными данными и построение хемоинформационных моделей, позволяющих предсказывать физико-химические, фотофизические, оптические свойства и реакционную способность синтезируемых соединений. Естественно, наиболее перспективные способы предсказания влияния заместителей на свойства органических соединений основаны на применении методов квантовой химии. Одним из распространенных методов расчета является применение нестационарной теории функционала плотности (TD-DFT), который, однако, не всегда точно предсказывает положение основной полосы поглощения органических красителей. Одним из способов решения данной проблемы является разработка новых регрессий линейного соответствия между расчётными и экспериментальными данными, либо модификация уже существующих регрессий такого типа путем построения оптимальных комбинаций базисов, функционалов, а также моделей растворителей.

Селевантьевым Ю.М. проведена целенаправленная разработка комбинированных методик расчета спектральных характеристик изученных дифильных спиросоединений, проведена оценка влияния длины алифатической цепи в молекуле фотохрома на его оптические свойства, и сделано сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными. Другой важной проблемой, решению которой посвящена настоящая работа, является изучение реакционной способности N-оксидов имидазолов. Установление Селевантьевым Ю.М. механизмов реакции N-оксидов с олефинами позволяет объяснять закономерности протекания процессов синтеза и предсказывать возможность получения тех или иных производных имидазолов.

Содержание работы соответствует сформулированным целям и задачам исследования. Основные положения, выносимые автором на защиту, научная новизна и теоретическая и практическая значимость работы Селевантьева Ю.М. соответствуют

требованиям паспорта специальности 1.4.4 – Физическая химия по критериям направлений исследований №№ 1, 10 и 11. Результаты работы отражены в научных статьях и докладах на конференциях.

В качестве замечаний можно отметить следующее:

Во-первых, превышение рекомендуемого объема для авторефератов кандидатской диссертации за счет использования мелкого шрифта и одинарного междустрочного интервала. Рисунки и таблицы не всегда обособлены абзацами, что приводит к неудобствам при прочтении текста автореферата.

Во-вторых, присутствуют нерасшифрованные аббревиатуры методов расчета, что также затрудняет чтение текста автореферата.

В-третьих, приведение максимумов полос поглощения без указания молярной экстинкции не позволяет однозначно судить о типе электронного перехода.

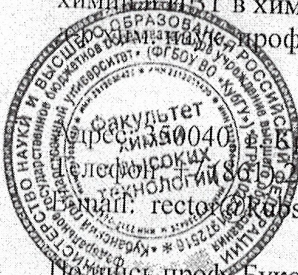
Наконец, практическая значимость результатов исследования отражена в автореферате декларативно без указания конкретных решений.

Несмотря на сделанные замечания, считаю, что диссертация Селевантцева Ю.М. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, соответствующую требованиям, предъявляемым Положением о порядке присуждения ученых степеней к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности: 1.4.4 – физическая химия.

18.08.2025

Профессор кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии ФГБОУ ВО «КубГУ»,
проф.

Буков Николай Николаевич



Краснодар, ул. Ставропольская, 149, ФГБОУ ВО «КубГУ»

Телефон: 8(902)19-95-02

E-mail: rector@kubsu.ru

Полный проф. Букова Н.Н. заверяю.

Секретарь факультета химии и высоких технологий

Кожарева В.А.