

О Т З Ы В

на автореферат диссертации

Баргашевич Екатерины Владимировны

«Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности»,

представленной на соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 02.00.04 – физическая химия

Тема, выбранная диссертантом и представленная в автореферате как «Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности» безусловно, является актуальной, поскольку затрагивает фундаментальные вопросы связи строения молекул с проявлением ими тех или иных физико-химических свойств, тем более, что все больше и больше возрастает необходимость создания новых органических материалов с требуемыми физико-химическими характеристиками.

Направленность на решение задачи количественного описания нековалентных специфических взаимодействий, развитие подхода к количественному описанию эффектов, определяемых множественными НКВ оправдана отсутствием систематических углубленных исследований, связанных с высоким уровнем моделирования в терминах характеристик распределения электронной плотности.

Вопросы, решаемые в данной работе, имеют и практическую значимость, например, обеспечивают возможность прогноза основности у новых азотсодержащих гетероциклов, что открывает путь к направленному синтезу таких соединений, содержащих в своей структуре атомы галогена и обладающих биологической активностью.

Заявленная диссертантом цель – установление особенностей структурной организации галогенсодержащих соединений с галогенными связями в терминах характеристик распределения электронной плотности; применение этих характеристик для анализа природы нековалентных взаимодействий галогенов и идентификации галогенных связей в комплексах и кристаллах; разработка на этой основе количественных прогностических дескрипторов физико-химических свойств вещества-, достигается в полном объеме путем последовательного решения грамотно поставленных восьми задач в семи главах диссертации.

Набор выбранных объектов достаточно широк и охватывает практически все известные на данный момент типы галогенных связей и другие нековалентные взаимодействия в молекулярных комплексах галогенов.

Для решения поставленных задач автор использует современные подходы: атомистический принцип многоцелевого моделирования, квантовую теорию атомов в молекулах и кристаллах Бейдера, метод редуцированного градиента электронной плотности Янга и метод взаимодействующих атомов Пендаса, пакеты программ FireFly 8.0.0, CRYSTAL09/14, AIMAll Professional, Multiwfn и WinXPRO.

Краткое описание в автореферате содержания работы дает представление о путях решения поставленных задач и получения достоверных данных по надежному моделированию структуры комплексов и кристаллов с галогенными связями, по степени влияния ближайших и удаленных атомов на свойства галогенных связей и т.д. Дает представление об объеме выполненных исследований и разработке диссертантом новых подходов к классификации нековалентных взаимодействий с участием галогенов, новых параметрических моделей, что позволяет ускорить получение вновь синтезируемых галогенсодержащих материалов различного прикладного назначения.

Основные результаты и выводы представлены 8 пунктами и отражают новизну и фундаментальность полученных диссертантом данных.

По материалам диссертации имеется 19 статей в рецензируемых научных журналах списка ВАК и индексируемых SCOPUS b Web of Science.

По актуальности и новизне представленных результатов, их научному и практическому значению, использованию современных методов исследования, объему публикаций, рецензируемая работа **Барташевич Екатерины Владимировны «Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности»**, соответствует требованиям п. 9 положения ВАК РФ «О порядке присуждения ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, **Барташевич Екатерина Владимировна**, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности *02.00.04 – физическая химия*.

Д.х.н., ст. н. с.
НИИ наноматериалов Ивановского
Государственного университета

/ О. Б. Акопова/

Акопова Ольга Борисовна
НИИ наноматериалов ИвГУ,
Ермака ул. 39, 153045
АкоповаОВ@gmail.com
Тел.(4932) 37-08-08

