

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Барташевич Екатерины Владимировны** «*Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности*», представленную на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия»

Актуальность работы обусловлена тем, что вопрос о межмолекулярных взаимодействиях очень важен для направленного синтеза соединений с требуемыми физико-химическими свойствами, являющегося основной задачей инженерии кристаллов. Анализ нековалентных взаимодействий (НКВ) особенно усложняется в случае кооперативных или конкурирующих взаимодействий. Рутинный РСА, дающий лишь информацию геометрического характера, не способен однозначно решить эту задачу, а применение прецизионных методов порой исключается отсутствием кристаллов необходимого качества или разупорядоченностью статистического и динамического характера. По этим причинам особенно *актуально* развитие теоретических методов исследования, дающих новые возможности в решении этого вопроса. Данная работа направлена на решение проблемы количественного и качественного анализа НКВ в кристаллах и комплексах галогенсодержащих соединений. Для решения этих задач автор базируется на наиболее современных методах описания НКВ, объединенных континуальными представлениями о распределении электронной плотности (ЭП) и ее производных, таких как квантовая теория атомов в молекулах Бейдера (QTAIM), метод редуцированного градиента электронной плотности Янга (NCI) и метод взаимодействующих атомов Педанса (IQA). Автор тщательно подходит к выбору инструментов исследования. Так, в развитие уравнений Эспинозы и соавторов (1998), были найдены корреляционные параметры, связывающие энергию галогенного взаимодействия с плотностями кинетической и потенциальной электронных энергий в критических точках ЭП для ряда Cl-Br-I. Достаточная точность коэффициентов позволяет использовать их при оценке энергии галогенных взаимодействий и является *новым и практически значимым* результатом. Кроме того, основываясь на воспроизводимости экспериментальных данных, выработаны рекомендации для расчета рассматриваемых автором

объектов, в том числе выбран наиболее адекватный базисный набор Дугласа-Кролла-Гесса DZP-DKH, учитывающий эффекты релятивизма для атомов йода. В связи с высокой склонностью к образованию иодагрегатов, автором была тщательно исследована связь йод-йод, независимо от ковалентного или нековалентного её характера, и получены эмпирические зависимости для оценки её энергии. Автором также был выработан количественный критерий, позволяющий выбирать иодсодержащие молекулы, способные к галоген-галогенным взаимодействиям с иодид-анионами, что является *практически важным* результатом для разработки новых анионных рецепторов.

Необходимо отметить, что некоторые результаты, полученные автором, не только представляют несомненный научный интерес, но и имеют потенциальную *практическую значимость* для развития представлений об электронной природе галогенных связей.

На наш взгляд, одним из *важнейших достижений* является также выявление автором, в качестве одного из критериев наличия галогенной связи, взаимного расположения границ атомных бассейнов электронной плотности и электростатического потенциала. Проникновение электронной плотности донора галогенной связи в бассейн электростатического потенциала акцептора, а также притяжение этой плотности к атомному ядру галогена, выделенное в качестве критерия наличия галогенной связи, является красивым и логичным.

При знакомстве с авторефератом возникают *замечания редакционного характера*. Краткое определение основных понятий и терминов, используемых в работе, существенно облегчающее восприятие текста реферата, сочетается с достаточно сложным языком изложения, а порой с прямо противоречивыми утверждениями. Так, на стр. 21 сначала утверждается, что взаимодействие S...I Тип А является галогенной связью, а ниже, по-видимому из-за какой-то опечатки, пишется, что такое взаимодействие нельзя назвать галогенной связью. Вероятно, в самой диссертации эта опечатка отсутствует. Автором был исследован широкий круг объектов, хотя и несколько эклектичный, что не умаляет новизны и интересности данного исследования.

Выше названные незначительные недостатки не влияют на общую высокую оценку работы. Выведенные закономерности и корреляционные зависимости могут быть *использованы в научной практике* для исследования подобных объектов.

