

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», на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Диссертационная работа Барташевич Е.В. посвящена актуальной проблеме современной физической химии, связанной с созданием органических соединений и материалов на основе галогенных связей с заданными физико-химическими свойствами. В работе поставлены и решены задачи по выявлению структурообразующих взаимодействий в большом количестве объектов с привлечением самых современных методов исследования. К ним относятся квантовая теория атомов в молекулах и кристаллах Бейдера, метод Пендаса и метод редуцированного градиента электронной плотности Янга. Расчеты выполнены с использованием современных программных комплексов FireFly, CRYSTAL, AIMALL, Multiwfn и WinXPRO. Высокая квалификация автора позволила получить важные и достоверные результаты, о чем свидетельствуют публикации по теме диссертации в ряде известных периодических изданий. Наиболее привлекательными из них, на мой взгляд, являются: новая трактовка принципа формирования галогенных связей, подход взаимодополняющих характеристик в комплексах с галогенными связями, получаемых названными выше методами Бейдера, Пендаса и Янга. А также рекомендации по надежному моделированию структуры комплексов и кристаллов с галогенными связями, и новая параметризация линейных уравнений для оценки энергии галогенных связей на основе корреляций с локальными значениями кинетической и потенциальной энергии в критических точках электронной плотности.

В качестве замечания отмечу, что было бы уместно усилить в работе количественные выводы, сделанные на основе анализа индикаторов, фигурирующих в примененных в работе теориях и моделях. Это выгодно бы поддержало полученные в диссертации результаты.

Автореферат написан ясно и достаточно полно для понимания содержания работы. Все сказанное свидетельствует о том, что диссертация Барташевич Е.В. удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям, и её автор заслуживает присвоения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Ведущий научный сотрудник
ФГБУН Институт проблем
химической физики РАН,
доктор химических наук,
профессор _____

Боженко Константин Викторович

Адрес: 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка, пр. акад. Н.Н. Семенова, 1. Тел.: 8(49652)21261, e-mail: bogenko@icp.ac.ru



25.11.15.
Боженко К.
[Signature]