

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»,
представленной на соискание ученой степени доктора химических наук.
Специальность 02.00.04 – физическая химия.

Докторская диссертация Барташевич Екатерины Владимировны посвящена исследованию важной взаимосвязи между распределением электронной плотности и свойствами химической связи. Это особенно актуально в связи с развитием в последнее время методов первопринципных расчетов, проводимых в рамках теории функционала плотности. В работе проведены квалифицированные расчеты кристаллических структур в программе CRYSTAL, предназначенной для периодических расчетов в рамках теории функционала плотности (а также методом Хартри-Фока). Разработан подход к описанию галогенных связей. Предложенный подход и другие выводы работы надежно обоснованы первопринципными расчетами. В работе рассмотрен ряд базисных наборов и обменно-корреляционных функционалов, охарактеризовано качество воспроизведения геометрии галоген-содержащих соединений. Получено отличное качество воспроизведения длин галогенных связей. Точность воспроизведения в ряде соединений составляет сотые ангстрема, что, по моему мнению, можно считать отличным результатом для *ab initio* расчетов. Основные выводы диссертации, подтверждаемые проведенными первопринципными расчетами, являются вполне обоснованными.

Результаты работы прекрасно изложены в публикациях, например – «Барташевич Е.В., Цирельсон В.Г. Успехи химии. (2014)».

Исходя из представленных в автореферате сведений, диссертация удовлетворяет требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, и соискатель – Барташевич Екатерина Владимировна заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Институт естественных наук
Уральского федерального университета
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

17.11.2015



Чернышев Владимир Артурович,

Доцент по кафедре компьютерной физики

Доцент, кафедра Компьютерной физики,

Институт естественных наук

Уральского федерального университета
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
кандидат физико-математических наук

по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния,

620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

Vladimir.chernyshev@urfu.ru

Подпись В.А. Чернышева заверяю

