

## 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 по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Диссертация Барташевич Е.В. посвящена изучению галогенных связей, к которым относятся нековалентные взаимодействия, в которых атом галогена выступает акцептором электронной плотности. Комплексы галогенов с тио(оксо)хинолинами и кристаллы олигойодидов халькогеназоло(ино)хинолиниевых рядов, изученные в работе, являются сложными объектами, способными к формированию множественных нековалентных взаимодействий галогенов. Такие соединения могут обладать свойствами йодофоров и проявлять биологическую активность. Таким образом, выбор объектов и направления научного исследования обоснован его актуальностью и практической значимостью.

Использование расчетных характеристик распределения электронной плотности для описания нековалентных взаимодействий галогенов в комплексах и кристаллах позволило диссертанту разработать количественные прогностические дескрипторы физико-химических свойств галогенсодержащих соединений. К таковым свойствам, рассмотренным в работе, относятся энергии галогенных связей и показатели основности азотсодержащих гетероциклов по шкале йода ( $pK_{B12}$ ).

В работе отработаны методики квантово-химического моделирования геометрических характеристик структуры и распределения электронной плотности в молекулярных галогенсодержащих комплексах и кристаллах с галогенными связями. В том числе, рассмотрены эффекты учёта релятивизма на уровне базисных наборов для атомов йода. Диссертант опирается на современные методы описания нековалентных взаимодействий, в которых используется разделение молекулы или молекулярного комплекса на атомные бассейны с сохранением атомистических представлений при анализе химической связи. К таким методам относятся: квантовая теория атомов в молекулах, метод редуцированного градиента электронной плотности и метод взаимодействующих атомов.

В качестве замечания можно отметить следующее: в работе отдельное внимание уделено применению оригинальных методов выделения различных вкладов в энергию атомных взаимодействий. Величины таких вкладов, к сожалению, не сопоставляются количественно с результатами традиционных расчетов, проводимыми, например, методами SAPT, позволяющими выделить и сопоставить, например, электростатические и дисперсионные вклады в полную энергию взаимодействий.

Автореферат написан ясным языком, содержит необходимые пояснения. Результаты исследований опубликованы в достаточном количестве изданий, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России.

Диссертация полностью соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней ВАК», предъявляемым к докторским диссертациям, и соискатель Барташевич Екатерина Владимировна заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Главный научный сотрудник

Центра фотохимии РАН,

д.х.н., профессор



А.А. Багатурьянц

119421 г. Москва, ул. Новаторов д. 7а, корп.1,

телефон (495)936-77-53, эл.почта [sasha@photonics.ru](mailto:sasha@photonics.ru)

Подпись А.А. Багатурьянца заверяю

(подпись)

(печать организации)

