

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

Целями представленной работы являются установление особенностей в структуре и некоторых свойствах соединений с галогенными связями на основе детального анализа различных характеристик распределения электронной плотности, разработка способов обнаружения галогенных связей в различных межмолекулярных и комплексных соединениях, а также поиск новых характеристик электронного распределения (автор называет их дескрипторами), которые могут быть использованы для прогноза физико-химических свойств веществ.

Представленная работа несомненно **актуальна**, поскольку галогенные связи являются одним из видов нековалентных взаимодействий, обеспечивающих стабильность структур как кристаллов, так и молекулярных комплексов (в том числе и в газовой фазе), во многом определяющих физико-химические свойства таких систем, в частности, термодинамические и спектральные свойства, особенности сольватации и др. А поскольку круг объектов, в которых галогенные связи играют важную роль очень широк, то **практическое значение** работы не вызывает сомнений.

В качестве основного метода исследования была выбрана квантовая теория атомов в молекулах Бейдера (QTAIM), позволяющая анализировать электронную плотность как теоретически рассчитанную методами квантовой химии, так и полученную из прецизионного рентгеноструктурного эксперимента. Также применялись метод редуцированного градиента электронной плотности Янга и метод взаимодействующих атомов Пендаса.

Соискателем рассмотрено около 200 объектов, включающих как традиционно рассматриваемые кристаллические структуры, так и, что на мой

взгляд очень важно, комплексы галогенов и межгалогенных соединений с молекулами NH_3 , H_2O , H_2S , C_2H_4 и CO , о структуре которых в газовой фазе имеются экспериментальные данные. На мой взгляд, исследование именно этих (более простых, чем кристаллы) систем, может дать надежную экспериментальную и теоретическую информацию для анализа природы рассматриваемых взаимодействий.

Сочетание различных методов анализа электронной плотности, крайне разумного выбора объектов исследования и использование различных экспериментальных данных во многом обеспечило **достоверность** получаемых результатов.

Работа выполнена на **высоком методическом уровне**, о чем свидетельствует большое внимание, которое соискатель уделяет методам диагностики нековалентного связывания и энергетических оценок этого взаимодействия. В результате соискателем дана новая трактовка принципа формирования галогенных связей, найдены критерии их устойчивости, выработана стратегия анализа нековалентных взаимодействий галогенов, опирающаяся на использование полученных разными методами и взаимодополняющих характеристик электронной плотности. Эти результаты определяют **научную новизну** представленной работы.

Положения, выдвигаемые на защиту хорошо обоснованы и убедительны, личный вклад автора диссертации в разработку этих положений и результатов достаточно велик, а сами результаты хорошо апробированы на российских и зарубежных конференциях и полно отражены в публикациях. Автореферат написан понятным литературным языком.

В качестве замечаний отмечу следующие:

1. В автореферате указано, что «расчеты систем, включающих атомы йода, должны проводиться с учетом релятивистских эффектов». Полностью согласен с этим утверждением, но на мой взгляд, релятивистские эффекты для атома брома тоже очень важны и требуют соответствующего учета. Также не ясно, учитывались ли диффузные функции в базисном наборе АО в расчетах с «тяжелыми» атомами галогенов.

2. В таблице 1 приведены разности расчетных и экспериментальных межъядерных расстояний для комплексов ICl с малыми молекулами. Обычно, если не указано иначе, расчетные данные отвечают r_e -структуре. А каким методом получены и какой « r -структуре» отвечают экспериментальные расстояния?

Указанные недостатки нисколько не снижают крайне положительного впечатления о работе в целом. Считаю, что представленная работа по объему и уровню соответствует предъявляемым к докторским диссертациям требованиям ВАК РФ, установленным «Положением о присуждении ученых степеней», утвержденном Постановлением правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842. Барташевич Екатерина Владимировна заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Кандидат химических наук,
ведущий научный сотрудник кафедры
физической химии Химического факультета,
ФГБОУ ВПО "Московский
государственный университет
имени М.В. Ломоносова"
119991, Москва, Ленинские горы, дом 1,
строение 3, ГСП-1, МГУ, химический
факультет
Тел. +7(495)939-36-89
lant@phys.chem.msu.ru

Батаев Вадим Альбертович

