

ОТЗЫВ НАУЧНОГО КОНСУЛЬТАНТА

**о диссертационной работе Барташевич Екатерины Владимировны на тему:
«Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности»,
выполненной на соискание учёной степени доктора химических наук
по специальности 02.00.04 – «физическая химия» и ее авторе**

Я познакомился с Екатериной Владимировной Барташевич в начале 2000-х на одной из научных конференций. Наши беседы привели к тому, что она заинтересовалась новыми методами анализа химических атомных и молекулярных взаимодействий, развиваемыми на кафедре квантовой химии Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. В результате в 2006 г. началось наше научное сотрудничество, которое успешно продолжается по настоящее время.

Несколько первых совместных публикаций получили хороший отклик и стали цитироваться в мировой научной литературе. Это позволило мне обратить внимание Е.В. Барташевич на то, что сформировавшееся направление следует развивать далее и, в перспективе, суммировать результаты в докторской диссертации. После раздумий Е. В. Барташевич согласилась с моим предложением, а затем мне поступила просьба выступить в роли научного консультанта.

Следует подчеркнуть, что тематику своей докторской диссертации Е. В. Барташевич сформулировала самостоятельно. Ей справедливо хотелось остаться в рамках тематики исследований, ведущихся на химическом факультете Южно-Уральского государственного университета (национального исследовательского университета), и использовать в работе уже накопленные знания и опыт. На мой взгляд, это ей удалось, поскольку соединения с галогенными связями синтезируются и интенсивно исследуются учеными ЮУрГУ и в этой области ими достигнут значительный прогресс. В тоже время, интерес к этим объектам растет и во всем мире.

Темой работы Е. В. Барташевич является структурная организация соединений с галогенными связями и установление новых количественных дескрипторов физико-химических свойств этих соединений по данным о распределении электронной плотности. Без развития этого направления осознанный целенаправленный поиск новых функциональных материалов на основе соединений с галогенными связями просто невозможен. К счастью, Екатерина Владимировна решила эту задачу, указав другим исследователям перспективные методы поиска. Для этого она привлекла самые успешные современные теоретические методы прогнозирования физико-химических свойств: квантово-топологическую теорию атомных и молекулярных взаимодействий, метод взаимодействующих атомов, индексы локализации/делокализации электронов, функцию Грина для электронной плотности, показывающую, как одни атомы влияют на другие в связанных системах, и т.д. В итоге, синергетическое и обоснованное приложение этих методов к сложным соединениям с галогенными связями, круг которых был тщательно подобран, принесло много важных и перспективных научных результатов. Они и представлены в диссертации.

Выполнение докторской работы потребовало от Екатерины Владимировны Барташевич большого труда. С самого начала было решено использовать в работе только новые, но уже положительно зарекомендовавшие себя подходы к исследованию структурной организации и количественных дескрипторов физико-химических свойств соединений с галогенными связями. Было запланировано сфокусировать внимание на поисках новых дескрипторов, которые дадут физико-химикам не только необходимую, но и понятную им информацию. Такая ориентация на новое требует комбинации кропотливой и творческой работы, что и продемонстрировала Е. В. Барташевич, трудясь над диссертацией. Она очень многому научилась за эти годы, и передает приобретенные знания студентам. Это очень важно.

Во всех совместно выполненных и опубликованных работах Е. В. Барташевич являлась лидером, научившись ставить и решать научные задачи на передовом мировом уровне. Результаты этих работ публиковались в лучших и авторитетных мировых научных журналах. Эта работа не осталась незамеченной научной общественностью: индекс цитируемости Е. В. Барташевич достиг передового мирового уровня (372 ссылки по Российскому индексу научного цитирования, индекс Хирша 8). В последние годы Е. В. Барташевич неоднократно приглашалась в качестве пленарного докладчика на престижные российские и мировые научные конференции как по тематике исследования и практического применения соединений с галогенными связями, так по квантово-химическим и физико-химическим методам исследования веществ и материалов.

Хочу отметить ориентацию Е. В. Барташевич на практическое применение получаемых фундаментальных результатов. В каждой работе она старалась найти зерно, полезное для направленного получения новых функциональных материалов.

Считаю, что Екатерина Владимировна Барташевич является высококлассным исследователем мирового уровня, подготовленная ею диссертация отвечает всем необходимым требованиям, а ее автор безусловно заслуживает присуждения ей учёной степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – «физическая химия»

Заведующий кафедрой квантовой химии
Российского химико-технологического
университета имени Д.И. Менделеева.
Докт. физ.-мат. наук, профессор,
Лауреат премии им. А. фон Гумбольдта

Москва 125047, Миусская пл. 9,
Тел:+7-499-978-9584
Факс:+7-495-609-2964

Электронный адрес: tsirel@muctr.ru
Сайт в интернет: <http://quant.distant.ru/>

В. Г. Цирельсон
20 июня 2015 г.

