

## 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»

Совершенствование уровня моделирования свойств различных функциональных материалов и понимание механизмов структурообразующих нековалентных взаимодействий в них - важные задачи современной химии. Поэтому **актуальность** диссертационной работы Барташевич Екатерины Владимировны, целью которой является установление структурной организации соединений с галогенными связями в рамках характеристик распределения электронной плотности, применение этих характеристик для идентификации галогенных связей в комплексах и кристаллах и разработка количественных прогностических дескрипторов физико-химических свойств соединений, не вызывает сомнений.

**Научная новизна** работы определяется широким рядом найденных автором впервые теоретических закономерностей и фактов, в-частности, в новой трактовке механизма формирования галогенных связей в рамках согласованной ориентации локальных областей концентрации и деконцентрации электронной плотности. Диссертантом впервые найдены устойчивые критерии галогенных связей на основе распределений градиентных полей электростатического потенциала и электронной плотности в комплексах иода и кристаллах халькогензамещенных азоциклов. Были успешно согласованно применены методы квантовой химии для выяснения природы нековалентных взаимодействий, стабилизирующих галогентринитрометаны. В результате исследования влияния ближайших и отдаленных атомов на галогенные связи с применением функции Грина для электронной плотности автором диссертационной работы было установлено, что в молекулярных комплексах замещенных пиридинов и фенантролинов с галогенами атом галогена вносит определяющий вклад в величину электронной плотности в критической точке галогенной связи.

Несомненна **практическая значимость** работы соискателя, в которой предложены новые инструменты идентификации галогенных связей, что непременно найдет применение в дизайне функциональных материалов. Автором созданы параметрические модели, позволяющие прогнозировать прочность галогенных связей в различных соединениях. Были определены критерии способности иодсодержащего гетероцикла вступать в реакции комплексообразования с  $I_3^-$ , рекомендованные к использованию при разработке новых анионных рецепторов. Для прогноза основности азотсодержащих гетероциклов Барташевич Е.В. предложена новая количественная модель расчета показателей основности по шкале иода.

Автореферат диссертационной работы Барташевич Е.В. позволяет судить о высоком уровне выполненных исследований, оригинальности постановки задачи, многообразии и согласованности применения самых современных методов молекулярного моделирования к большому количеству структур, значительной теоретической и практической ценности полученных результатов.

Научная новизна и достоверность выводов диссертационной работы сомнений не вызывают. Результаты работы опубликованы в авторитетных международных журналах.

Принципиальных замечаний по содержанию автореферата не возникло. Вместе с тем, возник вопрос:

На основании анализа электронных карт ЭСП комплексов гетероциклов с иодом, обсуждаемых на страницах 21-22, показано, что граница  $\phi$ -бассейна (I/S) в комплексах типа А вторгается в область  $\rho$ -бассейна атома I, т.е., наблюдается притяжение электронов атома иода к атому S. К какому типу нековалентных взаимодействий относится связь S.....I?

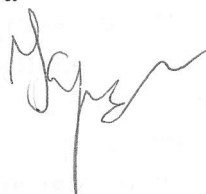
Вопрос носит дискуссионный характер и не снижает общего положительного впечатления от работы. Исследование Е.В.Барташевич имеет высокую научную и практическую ценность, а ее результаты представляют несомненный интерес для исследователей, работающих в области разработки новых функциональных материалов.

### Квалификационная оценка диссертации

Диссертация Екатерины Владимировны Барташевич «Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, полностью соответствующую требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842, а её автор заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Доктор химических наук, профессор  
заведующий лабораторией  
асимметрического синтеза  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Институт органического синтеза  
им. И.Я. Постовского Уральского отделения  
Российской академии наук

ФГБУН ИОС им. И.Я. Постовского УрО РАН  
620990, г. Екатеринбург,  
ул. С. Ковалевской, 22 / ул. Академическая, 20,  
официальный сайт: [www.ios.uran.ru](http://www.ios.uran.ru)  
тел./факс: (343)369-30-58,  
e-mail: [ca@ios.uran.ru](mailto:ca@ios.uran.ru)



В.П. Краснов

2.12.2015

Подпись Краснова Виктора Павловича заверяю:  
Ученый секретарь ФГБУН ИОС УрО РАН,  
кандидат технических наук



О.В. Красникова