

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»

Ознакомившись на сайте диссертационного Совета Д212.298.04 при Южно-Уральском университете с диссертацией и авторефератом Е.В. Барташевич, считаю возможным высказать свою оценку работы. Диссертация Барташевич Е.В. посвящена исследованию нековалентных взаимодействий галогенов и идентификации галогенных связей в комплексах азотсодержащих гетероциклов с галогенами, в соединениях галогентринитрометанов, в кристаллах олигойодидов халькогеназоло(ино)хинолиниевых ряда, обладающих высокой степенью йодагрегации и множественными нековалентными взаимодействиями атомов йода. Галогенные связи – важный вид специфических нековалентных взаимодействий, исследование которых является *актуальным* для разработки новых функциональных материалов, сочетающих свойства эластичности и барической устойчивости, обладающих низкотемпературной проводимостью или свойствами ионных жидкостей. Галогенные связи во всех фазовых состояниях вещества определяют структурную обусловленность столь разных физико-химических свойств, как теплоты сублимации, эффекты сольватации и др., а также влияют на ряд спектральных свойств соединений.

В основу исследования Барташевич Е.В. положены новые и современные методы описания нековалентных взаимодействий, опирающиеся на свойства электронной плотности: квантовая теория атомов в молекулах, метод редуцированного градиента электронной плотности, метод взаимодействующих атомов и др. Согласованное применение этих методов повышает достоверность получаемых результатов и дает выход на многочисленные прикладные задачи. В этом смысле данная диссертация представляет собой шаг вперед в физической химии.

Существенно, что в работе дана новая трактовка классического принципа формирования галогенных связей в терминах характеристик распределения электронной плотности. Получен ряд новых эмпирических моделей, описывающих энергию нековалентных взаимодействий галогенов на основе локальных характеристик плотности потенциальной и кинетической электронной энергии. Установлены особенности структурной

организации новых органических кристаллов халькогеназоло(ино)хинолиниевых олигойодидов. Разработаны количественные модели прогноза показателей основности по шкале йода pK_{B12} для азотсодержащих органических оснований. Конкретные результаты важны для развития физической химии органических соединений. Таким образом, *практическая польза* работы несомненна.

По теме диссертации опубликовано 19 статей в высокорейтинговых рецензируемых журналах с высоким импакт-фактором, в том числе, в журналах, рекомендованных ВАК. Работы известны мировой научной общественности и цитируются в литературе.

В целом, работа оформлена хорошо. Однако я отмечаю ряд опечаток и неточностей в подписях к рисункам.

Резюмируем, что диссертация Е.В. Барташевич представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, которая по тематике, объектной базе, содержанию и полученным результатам, а также по формуле и области исследования отвечает паспорту специальности 02.00.04 – «Физическая химия». По своему уровню, актуальности, достоверности и обоснованности выводов данная работа соответствует всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, установленным в п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а также приказами Минобрнауки России № 689 от 25 июня 2014 г. и № 1560 от 9 декабря 2014 г., а её автор Барташевич Екатерина Владимировна, несомненно, заслуживает присуждения степени учёной степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Кандидат химических наук, профессор
Биологический и химический факультет,
Университет Нью Мехико, Лас Вегас NM 87701, США
Тел: +1-505-454-3362

Тимофеева Татьяна Владимировна

Tatiana Timofeeva, PhD, Professor of Chemistry
Department of Biology and Chemistry
New Mexico Highlands University, Las Vegas NM 87701, USA
Phone: +1-505-454-3362

September 7, 2015

