

на автореферат диссертации **Екатерины Владимировны Барташевич** «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

Диссертационная работа Е.В. Барташевич посвящена установлению особенностей структурной организации галогенсодержащих соединений с галогенными связями с использованием характеристик распределения электронной плотности, применению этих методов для анализа природы галогенных связей с целью их идентификации в кристаллах, а также разработке количественных дескрипторов описывающих прочность и иные физико-химические характеристики галогенных связей.

Данное направление, безусловно, **актуально**, поскольку галогенные связи зачастую определяют трехмерную организацию молекул и комплексов в материале, а также свойства полученных материалов. При этом не существует четкого понимания, как отдельные компоненты молекулярных систем взаимодействуют между собой и каким образом можно управлять нековалентным связыванием в кристаллах и материалах для дизайна материалов с требуемыми свойствами. В то же время создание материалов нового поколения является актуальнейшей задачей современной химии. Разработанные в рамках диссертации подходы позволяют ускорить создание новых материалов, что обуславливает **практическую значимость** работы.

Научная новизна исследования Е.В. Барташевич заключается в том, что она впервые провела полноценное и исчерпывающее изучение принципа формирования и интерпретации природы галогенных связей. Был сформулирован критерий, позволяющий отличить галогенные связи от прочих типов взаимодействий и межатомных контактов. Были найдены дескрипторы, описывающие характеристики прочности галогенного связывания.

В ходе исследования диссертантом были использованы наиболее современные методы квантовохимического анализа электронной структуры, проведены систематические расчеты разнообразными функционалами теории функционала плотности и базисными наборами. Были сделаны важные методологические выводы об оптимальных методах расчета тех или иных характеристик галогеновых связей. Особо бы хотелось отметить, что диссертантом был проведен анализ природы галогенных связей с использованием целого спектра инструментов, от весьма простых, таких как топологический анализ электронной плотности, до весьма трудоемких расчетов в рамках подхода Взаимодействующего квантового атома. При этом проведенный Е.В. Барташевич анализ непротиворечив по своей сути, что получается совершенно не всегда при использовании методов анализирующих различные аспекты нековалентного связывания. В ходе работы было предложено большое количество различных уравнений и дескрипторов, которые позволяют производить оценку прочности галогенного связывания. Вкупе с уравнением Эспинозы для водородного связывания, предложенные ей уравнения могут использоваться для анализа прочности нековалентного связывания в кристаллах большинства органических молекул. Важными и интересными являются также предложенные автором подходы для классификации природы галогенного связывания: подход позволяющий отличить галогенные связи от простых межмолекулярных контактов, а также отличить ковалентные связи внутри молекул галогенов от галогенных связей. Было изучено большое число различных молекулярных систем, от относительно простых комплексов до кристаллов, и для всех них показана валидность предложенного автором общего принципа формирования галогенной связи.

Особо следует отметить сознательное стремление диссертанта создать подходы, которые позволят проводить выявление галогенных связей и их анализ на основании рентгеноструктурного эксперимента без привлечения квантовохимических расчетов кристаллов. **Выводы** и заключения логичны и обоснованы, и непротиворечиво вытекают из проделанной диссертантом работы. Имеется достаточно много публикаций, в том числе и в высокорейтинговых журналах. Большая часть результатов (10 из 19 статей) было опубликовано в самое последнее время, в 2014 году.

Изученный автореферат краток, и дает исчерпывающее представление о выполненной автором работе. Тем не менее, имеются отдельные замечания и предложения:

1. В работе описано множество регрессионных уравнений с достаточно высокими коэффициентами корреляции. Однако из данных, приведенных в автореферате, не всегда ясно, на каком числе данных данные регрессии были построены, являются ли коэффициенты регрессии и сами регрессии статистически значимыми.
2. В описании второй главы диссертации упоминается, что расчеты энергий связывания были проведены с использованием базисного набора DZP-DKH. Не ясно, почему авторы предпочли использовать двукратно-расщепленный набор, ведь известно, что трехкратно-расщепленные наборы лучше воспроизводят энергии и, кроме того, имеют меньшую суперпозиционную ошибку.
3. Зачастую не ясно, когда авторы брали для анализа электронную плотность из квантовохимических расчетов и когда была использована экспериментально найденная (и была ли использована).
4. Судя из описания шестой главы, метод редуцированного градиента дает ту же информацию, что и топологический анализ электронной плотности. Однако его визуальный анализ весьма затруднителен. Можно ли сказать, что топологический анализ является предпочтительным, ведь анализ этих данных более прост, а получаемая информация та же?

Тем не менее, высказанные замечания нисколько не умаляют ценности и значимости полученных результатов и могут быть следствием самой формы автореферата, в котором не могут (и не должны) быть изложены все полученные диссертантом результаты.

Работа Е.В. Барташевич является завершенным фундаментальным исследованием, выполненным на высоком научном уровне. Диссертант проявил себя целеустремленным, высококвалифицированным специалистом в области физической химии, ее работа полностью удовлетворяет требованиям ВАК к

докторским диссертациям, а сама ЕКАТЕРИНА ВЛАДИМИРОВНА БАРТАШЕВИЧ как ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук (хабилитация),

Главный научный сотрудник НИЛ

«Хемоинформатика и молекулярное моделирование» КФУ,

Директор лаборатории хемоинформатики

Страсбургского университета

А. Варнек

Кандидат химический наук,

Научный сотрудник НИЛ

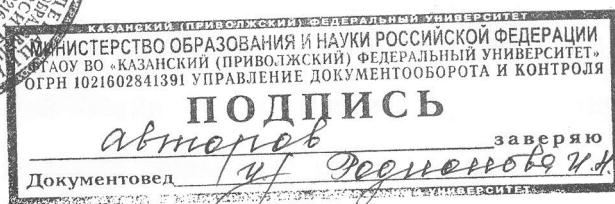
«Хемоинформатика и молекулярное

моделирование» КФУ

Т.И. Маджидов



24.11.15



ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»

Химический институт им. А. М. Бутлерова

420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18

Сайт: www.kpfu.ru

Тел.: (843) 233-74-63

E-mail (А. Варнек): varnek@unistra.fr

E-mail (Т.И. Маджидов): timur.madzhidov@kpfu.ru