

## О Т З Ы В

на автореферат диссертационной работы 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

**Актуальность** представленной работы для супрамолекулярной и теоретической химии определяется той ролью, которую нековалентные взаимодействия играют в окружающем нас мире. Выяснение тонких особенностей и специфичности галогеновых связей в последние годы является ключевым направлением исследований как химиков-синтетиков, структурщиков и теоретиков.

**Цель** работы: установление особенностей структурной организации галогенсодержащих соединений с галогенными связями в терминах характеристик распределения электронной плотности; применение этих характеристик для анализа природы нековалентных взаимодействий галогенов и идентификации галогенных связей в комплексах и кристаллах; разработка на этой основе количественных прогностических дескрипторов физико-химических свойств вещества. Для достижения поставленной цели ставились такие **задачи**, как: • новая трактовка классического принципа формирования галогенных связей в терминах характеристик распределения электронной плотности; • поиск новых устойчивых критериев галогенных связей; • отработка методик квантово-химического моделирования геометрических характеристик структуры и распределения электронной плотности; и некоторые другие.

Судя по приведенным в автореферате данным, а также при прочтении статей из приведенного списка публикаций, методы исследования, использованные автором, соответствуют поставленным задачам.

**Научная и практическая значимость** работы кратко могут быть выражены следующим образом: разработаны подходы к классификации нековалентных взаимодействий с участием галогенов, которые могут найти применение для развития инженерии кристаллов; электронные критерии, характеризующие способность иодсодержащего гетероцикла участвовать в комплексообразовании с иодид-анионами, *рекомендованы* для использования при разработке новых анионных рецепторов.

На основании анализа остального приведенного в автореферате материала можно ответственно заявить, что **цель** работы, сформулированная в постановочной части, автором **достигнута**, сопутствующие ей **задачи** полностью выполнены. Работа выполнена методически качественно, автореферат написан научным языком высокого уровня.

Мне представляется, что развитием данного исследования станет распространение авторского подхода на фторсодержащие системы, которые переживают настоящий бум как в медицинской химии, так и в материаловедении.

В целом, диссертация представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на актуальную тему развития новых теоретических подходов к описанию галогеновых связей. Результаты исследования могут быть использованы при разработке и конструировании новых галогенсодержащих материалов таких, как ионные жидкости, органические проводники, гели, жидкие кристаллы, а также анионные рецепторы. Таким образом, работа удовлетворяет всем требованиям, установленным п. 9 **Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842**, предъявляемым к кандидатской диссертации, а ее автор – Барташевич Екатерина Владимировна – заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Отзыв подготовлен на кафедре органической химии химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова, лаборатория супрамолекулярной химии и нанотехнологии органических материалов.

Ф.И.О. составителя:

Вацадзе Сергей Зурабович

Почтовый адрес:

119991 Москва,  
Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Телефон:

+74959391234

Адрес электронной почты:

[szv@org.chem.msu.ru](mailto:szv@org.chem.msu.ru) <http://vatsadze.ru>

Наименование организации:

ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»  
Химический факультет

Должность:

Профессор кафедры органической химии  
Химического факультета, д. х. н.

«11» декабря 2015 г.

