

## 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»  
на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04–  
физическая химия

В конце XX века нобелевский лауреат Жан Мари Лен в своей монографии «Супрамолекулярная химия: концепция и перспективы» писал: *«Молекулярная химия утвердилась в своей власти над ковалентной связью. Настало время овладеть в равной мере нековалентными межмолекулярными силами. За пределами молекулярной химии, основанной на манипулировании молекулярными связями, простирается область супрамолекулярной химии, которая призвана подчинить себе межмолекулярные связи»*. Поставленная им задача по-прежнему актуальна, хотя достижение столь амбициозной цели наталкивается на ряд препятствий, главное из которых – низкая энергетика невалентных взаимодействий и, как следствие, их слабая направленность и «предсказуемость». Именно поэтому исследования невалентных взаимодействий различными физико-химическими методами так важны для современной химии.

Поскольку химическая связь в конечном итоге означает то или иное перераспределение электронной плотности (ЭП), информация о невалентных межмолекулярных взаимодействиях (диссертант использует термин «нековалентные взаимодействия», НКВ) может быть извлечена из картины распределения ЭП в кристалле. Однако анализ ЭП не так прост, существует несколько методов ее интерпретации. В работе используются три современных метода: квантовая теория атомов в молекулах и кристаллах (теория Бейдера, AIM, наиболее наглядный и общеизвестный подход), метод редуцированного градиента электронной плотности (NCI) и метод взаимодействующих атомов Пендаса (IQA). Диссертационная работа посвящена систематическому исследованию так называемых галогенных связей (НКВ, в которых атом галогена выступает акцептором электронной плотности) с использованием указанных методов.

На мой взгляд, важное достижение диссертанта – вывод полуэмпирических соотношений, позволяющих надежно рассчитывать энергии различных атом-атомных взаимодействий из плотности кинетической и потенциальной энергии в критической точке (КТ) лапласиана ЭП. В конечном итоге для физической химии и для химии в целом важна именно энергия, и важность появления новых методов ее оценки трудно переоценить. Автор модифицировала известное соотношение Эспинозы-Лекомта, широко используемое для оценки энергии НКВ из величины плотности кинетической энергии в КТ, путем введения поправочных коэффициентов  $\beta$  и  $\gamma$ , зависящих от природы атома галогена, и показала, что в рядах соединений наблюдается очень надежная корреляция между энергией, рассчитанной «напрямую», и полученной из предложенного соотношения. Диссертант также предлагает новое соотношение, позволяющее связать энергию взаимодействий между атомами йода в полийодидах с расстоянием между атомами и величинами плотности кинетической и потенциальной энергии в КТ.

Не менее важны для физической химии предложенные диссертантом принципы классификации НКВ, основанные на свойствах распределения ЭП, а не на достаточно размытых геометрических критериях, широко используемых в литературе.

В качестве непринципиального замечания можно отметить следующее: не имеет большого смысла указывать в работе численные депозитарные коды депозитария при Кембриджском центре кристаллоструктурных данных (CCDC) (с. 26 автореферата). Для извлечения структурных данных, депонированных в депозитарии CCDC, в том случае, когда они не опубликованы, мало знать депозитарный код, надо также иметь другую информацию, доказывающую, что у запрашивающего есть право получить доступ к данным (например, он является рецензентом находящейся в печати статьи). Таким способом предотвращается кража неопубликованных данных. В том же случае, когда структурные данные опубликованы, они поступают в Кембриджский банк структурных данных (CSD) и хранятся в нем под буквенными рефкодами, которые и имеет смысл указывать. Данные, обсуждаемые в диссертации, уже опубликованы и хранятся в CSD под рефкодами DOWMEJ, DOWMAF, QIRZEY, ROKWEV, ZOJPAR, ZOJPEV и SULFUC. Именно их, на мой взгляд, и имело смысл привести в диссертационной работе.

Диссертационная работа Е.В. Барташевич производит очень сильное впечатление и без сомнения оставит глубокий след в науке. У меня не вызывает ни малейшего сомнения тот факт, что она полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям физико-химического профиля, а ее автор заслуживает присвоения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04–физическая химия.

доктор химических наук

Старший научный сотрудник

ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

Новосибирск 630090, пр-т Лаврентьева 3

тел (383) 3309466

email vir@niic.nsc.ru

Виревец Александр Викторович

Подпись Виревца А.В.  
заверяю \_\_\_\_\_  
Ученый секретарь ИНХ СО РАН  
" 14 " 10 2015 г.

