

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Юшиной Ирины Дмитриевны  
«ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ  
ХАЛЬКОГЕНАЗОЛО(АЗИНО)ХИНОЛИНИЕВЫХ ПОЛИЙОДИДОВ»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Представленная диссертация посвящена изучению влияния состава полийодид-аниона и его структуры на спектральные и термические свойства соединений халькогеназоло(азино)-хинолиниевого ряда. Известно, что полийодиды с органическим катионом широко применяются в виде органических проводников, сорбентов йода, компонентов солнечных батарей нового типа. Именно поэтому изучение их структуры и свойств в различных экспериментальных условиях и связанные с этим процессы потери йода при повышенных температурах являются актуальной задачей. Для решения этой задачи диссертантом был проведён широкий спектр исследований характеристик термического разложения монокристаллов полийодидов, охарактеризованы процессы потери йода, проанализированы особенности КР-спектров, а также выполнены квантово-химические расчеты электронной структуры исследуемых монокристаллов с использованием периодических граничных условий. Комбинация перечисленных методов является существенным достоинством данной работы и обеспечивает достоверность получаемых выводов.

В работе установлены особенности разложения монокристаллических йодидов различного состава в халькогеназоло(азино)хинолиниево́м ряду, впервые на основе анализа поляризованных спектров комбинационного рассеяния ориентированного монокристалла полийодида показана возможность извлекать информацию о взаимном расположении полийодид-анионов. На основе функции локализации электронов предложен удобный теоретический критерий, позволяющий идентифицировать связанный молекулярный йод в составе полийодид-анионов различного состава.

Автореферат написан ясным языком, содержит достаточное количество исходных данных, имеет пояснения, таблицы, рисунки, графики, достаточно полно отражает содержание диссертации. По теме диссертации опубликовано 15 печатных работ, из них 6 статей в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК или индексируемых в международных базах

данных. Представленный список публикаций свидетельствует о существенном личном теоретическом и экспериментальном вкладе диссертанта в представленное исследование. Замечаний по содержанию и оформлению автореферата нет.

Таким образом, можно заключить, что автореферат и диссертация Юшиной И.Д. представляют собой завершённую научно-квалификационную работу и отвечают паспорту специальности 02.00.04 – «Физическая химия». По уровню исполнения и представления, актуальности задачи, достоверности и обоснованности выводов данная работа отвечает всем требованиям ВАК РФ, включая п.9. «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (постановление Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 года), а её автор, Ирина Дмитриевна Юшина, заслуживает присуждения степени учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - Физическая химия.

Волошин Владимир Петрович, к.ф.-м.н.,  
снс Лаборатории молекулярной динамики и структуры  
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН

*Волошин*  
25.10.2016

Адрес: 630090, г.Новосибирск, ул. Институтская, 3,  
Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН  
E-mail: [voloshin@kinetics.nsc.ru](mailto:voloshin@kinetics.nsc.ru)

Тел.: +7(383) 333-28-54

Подпись Волошина В.П. заверяю  
Зав. канцелярией Зибарева Т.И.

