

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

Полийодиды с органическим катионом применяются в качестве ионных жидкостей, органических проводников, сорбентов йода, бактерицидных препаратов, компонентов солнечных батарей и др. Окислительно-восстановительная пара I_2/I_3^- играет транспортную и проводящую роль в составе этих элементов. Изучение стабильности структуры и свойств полийодидов в различных температурных интервалах и особенностей удержания и выделения избытка йода представляет собой *актуальную научную задачу*, которая является предметом интенсивных исследований. Диссертация Юшиной И.Д. посвящена установлению влияния структурных особенностей и состава полийодид-аниона на спектральные и термические свойства соединений халькогеназоло(азино)хинолиниевого ряда. Для достижения этой цели диссертантом проведены экспериментальные исследования термических и спектральных свойств этих соединений и неэмпирические квантово-химические расчеты соответствующих кристаллов. Этой комбинацией методов данная диссертационная работа особенно интересна и дает *достоверные* результаты. В работе дана интерпретация полученных данных и проведено их обобщение. В результате получена новая воспроизводимая и надежная информация о свойствах соединений халькогеназоло(азино)хинолиниевого ряда, которую можно уверенно использовать в прикладных целях.

В работе установлены этапы потери йода из трийодид-анионов в халькогеназоло(азино)хинолиниевом ряду; найдены условия управления процессами термического разложения монокристаллов тетраметиламмония пентайодида через варьирование скоростей нагрева; установлены примеры исключений из правила снижения термической стабильности монокристаллов при увеличении содержания йода в составе анионов. Впервые показана возможность на основе поляризованных спектров комбинационного рассеяния ориентированного комплексного монокристалла полийодида извлекать информацию о взаимном расположении трийодид-аниона и молекулы йода в кристалле. Найден эффективный теоретический индикатор (функция локализации электронов), дающий классифицирующий критерий идентификации связанного молекулярного йода в составе три- и полийодид-анионов.

Выявленные закономерности важны как для понимания и предсказания свойств соединений халькогеназоло(азино)хинолиниевого ряда, так и для развития физико-химии органических соединений в целом. Это существенный *практический результат* работы.

В качестве *замечания* отметим, что детали теоретических расчетов, безусловно, трудоемких и потребовавших от соискателя глубоких фундаментальных знаний и навыков, в автореферате приведены весьма скудно. А жаль.

По теме диссертации опубликовано 15 печатных работ, из них 6 статей в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, и 9 тезисов докладов на научных конференциях.

Можно заключить, что, судя по автореферату, диссертация Юшиной И.Д. 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 отвечает всем требованиям ВАК РФ, включая п.9. «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (постановление Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 года в редакции от 21.04.2016 года), а её автор Ирина Дмитриевна Юшина несомненно заслуживает присуждения степени учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 - Физическая химия.

Заведующий кафедрой квантовой химии

ФГБОУВО «Российский химико-технологический

университет им. Д.И. Менделеева»,

Докт. физ.-мат. наук, профессор,

Владимир Григорьевич Цирельсон

06.11.2016 г

Москва 125047, Миусская пл. 9,

Тел:+7-499-978-9584/9736

Факс:+7-495-609-2964

Электронный адрес: tsirel@muctr.ru

Интернет- сайт: quant.distant.ru

Подпись проф. В.Г. Цирельсона удостоверяю.

Ученый секретарь РХТУ им. Д.И. Менделеева

Подпись Цирельсона В.Г.
УДОСТОВЕРЯЮ



МЕНДЕЛЕЕВА

Т.В. Гусева