

О Т З Ы В

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

Тема, выбранная диссидентом и представленная в автореферате как «*Физико-химические свойства и структурные особенности халькогеназоло(азино)хинолиниевых полийодидов*», является актуальной, поскольку относится к фундаментальной области исследований и посвящена поиску связи структурных особенностей практически используемых полийодидов определенного строения с их физико-химическими свойствами: температурной стабильностью, способностью к удержанию и выделению избытка молекулярного йода.

Согласно теме диссертации автором была поставлена и цель исследований.

Объекты, выбранные диссидентом, являются новыми соединениями и включают полийодид анионы различного состава с перспективой практического использования результатов их исследования для оценки прочности связывания молекулярного йода, прогноза температурных интервалов их стабильности, для исследования механических деформаций и анизотропных проводящих свойств в новых материалах, в инженерии проводящих кристаллов, новых органических йодофоров.

Из содержания автореферата следует, что поставленные в работе задачи, диссидент успешно решил и получил новые систематические экспериментальные и расчетные данные для нового ряда монокристаллических полийодидов халькогеназоло(азино)хинолинов такие, как данные по их термостабильности, по особенностям их *KР* спектров, сведения по квантово-химическим расчетам таких полийодидов.

Для решения поставленных задач диссидент использует современные методы исследования: термический анализ, спектроскопию *KР*, такие компьютерные программы, как CRYSTAL14 и TOPOND14.

Краткое описание в автореферате содержания работы дает представление о путях решения поставленных задач и получения достоверных экспериментальных и расчетных данных, сопоставления их и извлечения новой информации по свойствам моно- и полийодидов. Дает представление об объеме выполненных исследований, который соответствует требованиям к кандидатским диссертациям.

Интересными являются следующие моменты. Автором показано, что идентификация связанного молекулярного йода только на основе структурных данных не

всегда надежна. Она становится более надежной, если дополнительно использовать спектры *KP* для этой идентификации. Представляют интерес и данные о поляризованных спектрах ориентированных монокристаллов, что позволяет получить информацию о взаимном распределении йодных доменов по всему объему кристалла без привлечения РСА, а это привлекательно для изучения анизотропии свойств монокристаллов. Из результатов квантово-химических расчетов кристаллических полийодидов представляет интерес найденный электронный классификационный критерий, который, дает основание идентифицировать связанный молекулярный йод в составе три- и полийодиданионов. Им является значение функции локализации электронов выше 0,5 в критических точках электронной плотности связей йода.

Основные результаты и выводы представлены 5 пунктами и отражают новизну, фундаментальность, практическую значимость полученных диссертантом данных, а также соответствуют решению поставленных задач.

По материалам диссертации опубликовано 6 научных статей в рецензируемых научных журналах списка ВАК, 4 из них индексируется Web of Science. Результаты работы докладывались 9 раз на конференциях различного уровня с 2011 по 2016 год. Работа была поддержана рядом грантов.

По актуальности и новизне представленных результатов, их научному значению и практической направленности, применению современных методов исследования, объему публикаций, рецензируемая работа **Юшиной Ирины Дмитриевны «Физико-химические свойства и структурные особенности халькогеназоло(азино)хинолиниевых полийодидов»**, соответствует требованиям п. 9 положения ВАК РФ «О порядке присуждения ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, **Юшина Ирина Дмитриевна**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Д.х.н., ст. н. с.
НИИ наноматериалов Ивановского
Государственного университета

Акопова Ольга Борисовна
НИИ наноматериалов ИвГУ,
Ермака ул. 39, 153045
AkopovaOB@gmail.com
Тел.(4932) 37-08-08

/ О.Б. Акопова/

