

Отзыв

о диссертационной работе Нелюбиной Юлии Владимировны
на автореферат на соискание учёной степени «доктора химических наук по
специальности 02.00.04- физическая химия»

«Экспериментальное распределение электронной плотности в кристаллах: «ключ» к
пониманию межмолекулярных взаимодействий и определяемых ими свойств»

Метод рентгеноструктурного анализа на сегодня является мощным средством изучения строения веществ. Вследствие этого развитие методов математической обработки дифракционных данных является важной и актуальной задачей. Использование «гибридных» методов позволяет удачно преодолеть ограниченность данных традиционного РСА, высокие требования к качеству анализируемых объектов прецизионного РСА и изначальную абстрактность классических квантовохимических расчётов. Применение такого подхода весьма плодотворно в изучении природы химических связей и межмолекулярных взаимодействий. Оно зачастую приводит к неожиданным, но на самом деле глубоко обоснованным выводам о характере взаимодействий, например, о связывающем типе анион-анионных взаимодействий в кристалле, способных преодолеть силы кулоновского отталкивания.

Продemonстрированные автором успехи в изучении природы межмолекулярных взаимодействий, успешное применение метода «инвариантов» в построении пространственной электронной плотности на основе дифракционных данных, имеет общее значение как в органической химии, для анализа молекулярных структур, так в неорганической химии, в частности, при оценке структуры ионных кристаллов. Получаемые данные распределения электронной плотности важны для прогнозирования разнообразных физических свойств кристаллов, таких, как магнитная активность, электропроводность, фазовые переходы, а также для анализа биологической активности соединений.

Автор заслуживает искомой степени доктора химических наук.

академик О.Н. Чупахин
научный руководитель
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института органического синтеза Уральского Отделения
Российской академии наук
620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22/Академическая, 20
Chupakhin@ios.uran.ru

Подпись О.Н. Чупахина **заверяю.**

Учёный секретарь ИОС Уро РАН

к.т.н.

 О.В. Красникова

