

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Береговой Ирины Владимировны  
«Адиабатические поверхности потенциальной энергии — основа  
квантовохимической интерпретации структурных особенностей и реакционной  
способности органических ион-радикалов и их ассоциатов с нейтральными  
молекулами»,  
представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по  
специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика  
экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Береговой И.В. посвящена теоретическому изучению строения и свойств важнейших промежуточных соединений в органических реакциях — ион-радикалов. Поскольку многие реакции в органической и биологической химии протекают через образование таких ионных интермедиатов, то работа несомненно является **актуальной**.

Автор использует подход, основанный на анализе формы поверхностей потенциальной энергии исследуемых систем, а не ограничивается исследованием равновесных геометрических конфигураций и одномерных путей минимальной энергии. Такой подход является универсальным и, учитывая, что исследуемые системы являются конформационно нежесткими, обеспечивает **высокую обоснованность** представленных в диссертации **научных достижений**.

**Высокая достоверность** результатов обеспечивается высоким уровнем квантово-химических методов, используемых автором для их получения. Также отмечу, что в диссертации было использовано не только приближение изолированной молекулы (в вакууме), но и более строгий подход: в рассмотрение были включены противоионы и учитывалось влияние растворителя. Имеется большой экспериментальный материал, с которым согласуются представленные результаты. Такие систематические исследования проведены автором **впервые**.

Полученные в работе результаты имеют **большое практическое и теоретическое значение**, поскольку позволяют связать различные проявления структурной нежесткости изучаемых интермедиатов с их активностью в химических реакциях и могут быть в дальнейшем использованы при планировании органического синтеза.

Автореферат написан понятно, грамотным литературным языком с соблюдением научного стиля.

Считаю, что диссертационная работа «Адиабатические поверхности потенциальной энергии — основа квантовохимической интерпретации структурных особенностей и реакционной способности органических ион-радикалов и их ассоциатов с нейтральными молекулами» соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, в том числе отвечает критериям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Береговая Ирина Владимировна, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Батаев Вадим Альбертович

*Батаев* 20.05.2024

кандидат химических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия,  
ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии  
ФГБОУ ВПО "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова"  
119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический  
факультет

Тел. +7(495)939-36-89

[bataevva@my.msu.ru](mailto:bataevva@my.msu.ru)

