

## 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

Изучение механизмов разнообразных химических реакций с участием высокореакционных короткоживущих ион-радикальных интермедиатов является одной из важнейших задач, стоящих перед теоретической химией. Это диктуется как необходимостью понимания всех стадий протекания химических превращений и планирования целенаправленного синтеза практически полезных химических соединений, так и для интерпретации спектральных данных по структурно-нежестким системам. Поэтому диссертационную работу И. В. Береговой, посвященную изучению строения, свойств и внутренних превращений ряда классических ион-радикалов следует признать актуальной.

Диссертация И. В. Береговой выполнена с привлечением современных методов функционала плотности и, в некоторых случаях, *ab initio* методов MP2 и EOM-IP-CCSD. Достоверность и обоснованность полученных научных результатов следует из согласия опытных и рассчитанных ЭПР характеристик исследуемых структур, а также успешного объяснения экспериментальных закономерностей протекания некоторых химических реакций, например, восстановительного гидродефторирования полифтораренов.

В представленной работе автором была разработана комплексная методология изучения механизмов химических реакций, включающих стадии внутренних превращений ион-радикальных частиц. Она включает расчёт поверхности потенциальной энергии (ППЭ) ион-радикала, участвующего в реакции, оценку относительной стабильности структур, соответствующих минимумам ППЭ, и высоты барьеров перехода между ними, возможности изменения пути химической реакции за счёт вовлечения близких по энергии конформеров с различным характером распределения спиновой плотности. Автором продемонстрирована важность учёта конформационных превращений не только для изолированных структурно нежестких ион-радикалов, но также и для их межмолекулярных комплексов с молекулами растворителя.

С большим интересом читается раздел автореферата, посвящённый изучению ППЭ сэндвичевых димеров ароматических соединений и их ион-радикалов.

Важными представляются результаты, полученные при изучении ионизации диметилвых эфиров полиэтиленгликолей и этиленкарбоната. Образование молекулярных ассоциатов, предшествующее ионизации этих соединений, может объяснить экспериментально наблюдаемый распад их катион-радикалов (КР), энергетически невыгодный для изолированного КР.

В целом, работа выполнена на высоком научном уровне, ее результаты важны для развития химической физики и представляют интерес для специалистов в области теоретической химии.

Принципиальных замечаний, ставящих под сомнение полученные результаты, нет. Сделанные диссертантом выводы и разработанные положения отличаются новизной и оригинальностью.

В рецензируемой научно-квалификационной работе решена научная задача по разработке методологии изучения химических реакций с участием структурно нежёстких ион-радикалов.

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 порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а её автор, Береговая Ирина Владимировна, заслуживает присуждения искомой степени доктора химических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Белоголова Елена Федоровна

доктор химических наук по специальности  
02.00.08 – химия элементоорганических соединений  
старший научный сотрудник лаборатории структурных исследований  
Иркутского института химии им. А. Е. Фаворского СО РАН

« 7 » мая 2024 г.

664033, Россия, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1  
Тел. +7 (3952) 42-70-14  
Электронная почта: lена@irioch.irk.ru

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

