

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 исследованию адиабатических поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) структурно-нежестких органических ион-радикалов. Актуальность работы не вызывает сомнения вследствие того, что исследуемые системы являются ключевыми интермедиатами многих химических и биохимических процессов, свойства которых вследствие структурной их нежесткости и сложности ППЭ остаются недостаточно изученными. Структурные искажения этих систем порождаются ян-теллеровскими эффектами, что приводит к богатству и разнообразию локальных минимумов их ППЭ, и их детальное изучение в случае многоатомных органических молекул представляет вопрос фундаментальной важности. Научная новизна исследования определяется, во-первых, получением и систематическим анализом данных о структуре ППЭ большого числа систем, которые не были изучены ранее, причем многие из них были впервые зарегистрированы или исследованы экспериментально по результатам теоретических предсказаний, сделанных в диссертационной работе. Во-вторых, теоретические исследования, проводимые в сотрудничестве с экспериментаторами, позволили усовершенствовать ряд экспериментальных методик и стимулировали новые направления экспериментальных исследований. На основе полученных данных объяснено большое количество наблюдаемых результатов, касающихся процессов, в которых исследуемые ион-радикалы являются короткоживущими интермедиатами. Практическая значимость работы, на наш взгляд, состоит в том, что полученные в работе данные позволяют оптимизировать условия проведения важных химических процессов (в т.ч. синтеза) с целью повышения их выхода и селективности. Достоверность полученных результатов не вызывает сомнения, принимая во внимание тщательный анализ полученных данных, тесную увязку теоретических результатов с экспериментальными данными, а также публикации результатов в ведущих международных журналах. Выводы, приведенные в автореферате, адекватно отражают установленные закономерности. Работа соответствует паспорту специальности 1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. Автореферат аккуратно оформлен, написан в хорошем научном стиле.

В качестве замечаний следует указать ряд вопросов, которые не нашли достаточного освещения в автореферате:

1. Внимание автора диссертационной работы сконцентрировано на исследовании адиабатических ППЭ. При этом недостаточное внимание уделяется возможностям протекания неадиабатических процессов, поскольку сближение различных листов ППЭ в изучаемых системах может быть весьма заметным. Следовало бы проанализировать ряд изучаемых систем (или их

упрощенных модельных аналогов) с целью анализа вероятности неадиабатических переходов. Однозначный ответ на вопрос о предпочтительности протекания процессов на адиабатических ППЭ значительно бы повысил фундаментальность полученных выводов.

2. Квантовохимические методы, использованные в работе, в большинстве случаев являются вариантами теории функционала плотности. Не умаляя важности и справедливости полученных результатов, хотелось бы получить более полную информацию, проводилось ли систематическое сравнение получаемых данных с результатами высокоточных неэмпирических методов типа CCSD(T), CAS-SCF, XMCQDPT и т.д., хотя бы для упрощенных модельных систем? Проводилась ли какой-то анализ точности различных функционалов DFT по результатам этого сравнения с целью выбора наиболее адекватного функционала?

Приведенные вопросы и замечания не снижают общее положительное впечатление о работе.

Содержание автореферата свидетельствует о том, что диссертационная работа Береговой Ирины Владимировны «Адиабатические поверхности потенциальной энергии – основа квантовохимической интерпретации структурных особенностей и реакционной способности органических ион-радикалов и их ассоциатов с нейтральными молекулами» является самостоятельно выполненной, законченной научно-квалификационной работой, соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, в частности, п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в редакции 2023 г.). Ее автор Береговая Ирина Владимировны 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 данных в аттестационное дело и их дальнейшую обработку.

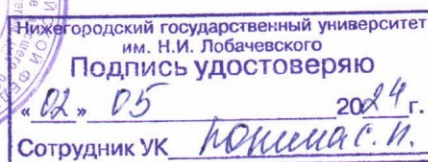
Профессор кафедры физической химии

Нижегородского государственного университета

им. Н.И. Лобачевского, д.х.н., профессор

С.К. Игнатов

Подпись Игнатова С.К. заверяю



Контактная информация:

Игнатов Станислав Константинович,

д.х.н., профессор, профессор кафедры физической химии

ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», 603022 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23. Тел. +7(831)4623090,

Электронная почта: ignatov@unn.ru

«30» апреля 2024 г.