

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Ирины Владимировны Береговой** «*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

Квантовохимическое изучение поверхностей потенциальной энергии реакционных систем, приносящее уникальную научную информацию, недоступную иными методами, необычайно важно для дальнейшего развития как фундаментальной химии, так и ее практических приложений. В связи с этим **актуальность** диссертационной работы И. В. Береговой очевидна.

**Научная новизна и оригинальность** диссертационной работы И. В. Береговой состоят в предложенном и реализованном теоретическом подходе к изучению структуры и реакционной способности органических ион-радикалов и их ассоциатов с нейтральными молекулами, основанном на современных квантовохимических расчетах адиабатических поверхностей потенциальной энергии методами теории функционала плотности. Таким образом, в работе **решена существенная научная проблема** в области химической физики. Работу отличает высокий научный уровень, выраженный, в частности, в соблюдении всех современных стандартов научного качества, связанных с применением методов вычислительной квантовой химии и экспериментальной верификацией их данных, в рассматриваемом случае – методом спектроскопии электронного парамагнитного резонанса. В связи с этим, **достоверность результатов** и **обоснованность выводов** диссертационной работы **И. В. Береговой** не вызывают сомнений.

Безусловная **научная значимость** диссертационной работы И. В. Береговой состоит в выявлении имманентной связи структурной нежесткости органических ион-радикалов с их реакционной способностью, и выработке оригинальных подходов к изучению данной связи. Предложенный и реализованный в работе теоретический подход имеет общий характер и заведомо распространяем на ион-радикалы множества других ароматических органических соединений, включая гетероциклические. Результирующее глубокое понимание механизмов химических реакций позволяет их целенаправленно регулировать,

в частности, при синтезе практически полезных веществ, что придает диссертационной работе несомненную *практическую значимость*.

Высокая научная культура диссертационной работы И. В. Береговой отображена и в ее *языке и стиле* – практически безупречных. Недостатков, достойных упоминания и публичного обсуждения, автореферат не содержит.

Несомненно, диссертационная работа И. В. Береговой *полностью соответствует всем требованиям* п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 (в действующей редакции). **Ирина Владимировна Береговая**, безусловно, заслуживает присуждения ей искомой ученой степени доктора химических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

**Зибарев Андрей Викторович**

доктор химических наук по специальности 1.4.3 – органическая химия

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

главный научный сотрудник лаборатории гетероциклических соединений

630090 Новосибирск, пр. Лаврентьева, д. 9, НИОХ СО РАН

контактный телефон: (8 383) 330 9664

адрес электронной почты: zibarev@nioch.nsc.ru

*«Согласен с включением персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку»*

**20.05.2024**

*«Подпись А. В. Зибарева заверяю»*

Ученый секретарь НИОХ СО РАН к.х.н. Р. А. Бредихин



20.05.2024