

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Белоголовой Александры Максимовны «Методы электронного пропагатора для изучения молекулярных состояний, образующихся при отрыве и присоединении электрона», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 "Физическая химия»

Диссертационная работа Белоголовой Александры Максимовны «Методы электронного пропагатора для изучения молекулярных состояний, образующихся при отрыве и присоединении электрона» посвящена программной реализации и установлению точности новых, основанных на приближении алгебраического диаграммного построения (ADC), методов расчета энергий и свойств молекул с присоединенным (EA) и удаленным (IP) электроном (методы IP/EA-ADC(n)/ISR(m), вплоть до порядка теории возмущений $n = 3$ и $m = 2$). Тестирование точности проведено путем сравнения энергий вертикальной ионизации и присоединения электрона, а также дипольных моментов конечных состояний, рассчитанных реализованными методами, с результатами расчета методом полного конфигурационного взаимодействия (FCI) для серии двух и трехатомных диамагнитных молекул и радикалов. Данный тестовый набор был сформирован и все FCI расчеты для него проведены автором диссертации. Автором был также реализован метод на основе комплексного абсорбирующего потенциала (CAP) – метод CAP/EA-ADC, позволяющий рассчитывать энергии и времена жизни метастабильных (резонансных) состояний с присоединенным электроном.

Кроме того, в диссертационной работе Белоголовой с использованием реализованных методов проведены расчеты свойств важных и достаточно сложных химических объектов и дана интерпретация имеющихся для них экспериментальных данных: рассчитан и проинтерпретирован спектр ионизации гальваноксильного радикала, проведен расчет электронной структуры комплекса с гистидином (6-4)тимин-тиминовых димеров с присоединенным электроном и установлена локализация последнего на димере, проведены расчеты, выполнено отнесение спектра C 1s ионизации молекулы CH₃I и установлена важность учета релятивистских эффектов.

Знакомство с авторефератом и публикациями автора показало, что ею выполнен очень большой объем теоретической работы. В целом автореферат очень хорошо написан, все результаты четко и ясно изложены и подтверждают обоснованность выводов данной диссертационной работы. Все научные результаты автора уже опубликованы в 5 статьях в научных журналах, индексируемых WOS и SCOPUS, причем четыре из них в престижном

журнале первого квартиля J. Chem. Phys. Результаты автора также прошли апробацию на трех всероссийских научных конференциях.

Диссертация Белоголовой А.М. «Методы электронного пропатора для изучения молекулярных состояний, образующихся при отрыве и присоединении электрона» является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком теоретическом уровне, она полностью соответствует требованиям ВАК к кандидатским диссертациям, изложенным в пункте 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. В ходе выполнения работы соискатель Белоголова А.М. продемонстрировала высокую профессиональную квалификацию и, бесспорно заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.1.4 – Физическая химия.

Доктор химических наук
специальность 02.00.04 – Физическая химия

Профессор кафедры химической и биологической физики
Новосибирского государственного университета

Заведующая лабораторией Механизмов реакций

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения РАН

Ул. Институтская, 3, Новосибирск, Россия, 630090

Тел: +7(383) 333-30-53, email: gritsan@kinetics.nsc.ru

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

Грицан Нина Павловна
04.08.2021

Подпись Н. П. Грицан уполномоченно

Заместитель
ИХКГ
по научной работе
Валиуллин С. В.

04.08.2021

