

## ОТЗЫВ

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 А. М. посвящена развитию теоретических методов описания процессов отрыва и присоединения электрона к молекулам и образующихся в этих процессах молекулярных состояний в рамках метода алгебраического диаграммного построения в терминах "промежуточных" состояний в различных порядках теории возмущений. Кроме вычисления энергии ионизации и энергии сродства к электрону, такой подход открывает новые возможности изучения взаимодействия молекул с внешними полями, например, вычисления дипольных и мультипольных моментов, констант сверхтонкого взаимодействия ЭПР, а также к расчёту метастабильных состояний молекул с использованием комплексного абсорбирующего потенциала.

В работе следует особо отметить разработку программ, реализующих развиваемые методы, и их интегрирование с широко известными квантово-химическими программами. Значимым является и создание набора молекулярных данных по энергиям переходов в состояния с оторванным и присоединённым электроном и дипольными моментами, полученными методом полного конфигурационного взаимодействия, дающего точное решение электронного уравнения Шрёдингера для использованного набора базисных функций, который позволил оценить точность разработанных методов.

Важными также являются исследования геометрического строения, электронной структуры и спектров ионизации ряда молекул, представленных в диссертационной работе. Расчёты спектра ионизации и электронной структуры низших катионных состояний гальвиноксильного радикала ( $C_{29}H_{41}O_2$ ), широко используемого в химии как акцептора активных радикалов и реагента при исследовании элементарных актов с участием радикальных интермедиатов, позволили отнести и рассчитать с высокой точностью энергии двух низших пиков и показать, что при образовании катиона в состоянии  $1^1A$  изменения электронной плотности относятся преимущественно к кольцевой  $\pi$ -системе, а в состоянии  $2^3B$  появляются изменения плотности в области метинового мостика. Использование теоретических методов, разработанных в диссертационной работе, для исследования ферментативного восстановления фотоповреждений ДНК, возникающих под действием УФ-радиации, впервые предсказали правильный

