

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

Диссертация Белоголовой А.М. посвящена разработке программной реализации методов IP/EA-ADC/ISR для электронного пропагатора, определения их точности, а также выявлению перспектив использования в приложениях. Тема диссертации представляется весьма актуальной, поскольку она касается развития современных методов квантовой химии, введения их в программный продукт с целями дальнейшего практического применения при изучении молекулярных систем.


Автором разработана группа новых пропагаторных методов IP/EA-ADC/ISR для расчета свойств и параметров строения молекул в состояниях, образующихся в результате отрыва и присоединения электрона. Создано соответствующее программное обеспечение, связанное с пакетами программ «Gamess» и «Q-Chem», также установлена точность новых методов относительно данных метода FCI (полного конфигурационного взаимодействия).

В диссертации получено большое количество интересных в научном плане расчетных результатов; среди них можно выделить, например, следующие. Проведен расчет спектра ионизации гальвиноксильного радикала. Рассчитанный спектр хорошо согласуется с данными ФЭС и позволяет провести отнесение наблюдаемых полос. С использованием метода EA-ADC(3)/ISR(2) рассчитано электронное строение комплекса с присоединенным электроном в реакции ферментативной репарации фотоповреждений ДНК. В приближении ADC(4)/CVS проведены расчеты и выполнено отнесение спектра S_1s ионизации молекулы CH_3I . Рассмотрен вопрос о влиянии релятивистских эффектов на интенсивность фотоэлектронных сателлитов.

О высоком уровне проведенных квантово-химических расчетов свидетельствует хорошее качественное соответствие расчетных и экспериментальных спектров ионизации, а также очень хорошее согласие теоретических и экспериментальных значений потенциалов ионизации (малые средние и максимальные абсолютные ошибки). В целом, результаты исследования существенно расширяют функционал вышеупомянутых программных продуктов, что должно привести к дальнейшему развитию вычислительных методов и их применений в физике, химии и биологии. Замечаний по существу у меня нет.

Исходя из автореферата, можно заключить, что по объему, научному уровню, научной новизне, практической значимости, количеству и качеству научных публикаций, данная диссертация соответствует требованиям, предъявляемым к диссертационным работам, а ее автор – Белоголова Александра Максимовна, заслуживает учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Ведущий научный сотрудник группы перспективных исследований федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский национальный исследовательский технический университет» (ФГБОУ ВО ИРНИТУ), кандидат химических наук


Петрушенко Игорь Константинович
(02.00.04 – физическая химия)

664074, Российская Федерация, г. Иркутск, ул. Лермонтова 83.

Тел. + 7 (3952) 405-100

E-mail: igor.petrushenko@istu.edu

г. Иркутск, 23.08.2021 г.

