

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Белооголовой А.М. «Методы электронного пропагатора для получения молекулярных состояний, образующихся при отрыве и присоединении электрона», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия.

Наш опыт рецензирования таких непростых в теоретическом отношении работ как представленная подсказывает, что объективность оценки возрастает при участии в ней нескольких референтов.

Хорошо известно, что метод фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС) является информативным методом исследования состава и электронного строения вещества. Для анализа обычно используют сдвиги основных линий ФЭС, которые связаны со степенью окисления. Сателлитные линии возникают в результате электронных переходов под действием потенциала вакансии с занятых орбиталей на вакантные. Сателлиты делятся на три типа монополюсные или shake-up, динамический эффект (при котором исходная вакансия заполняется) и переходы с переносом заряда. Первые два типа сателлитов в основном определяются оболочкой ионизируемого атома и для них развиты эффективные методы функций Грина (спектральных функций). Основной интерес для анализа различных физико-химических задач представляют сателлиты с переносом заряда, однако для них до сих пор, как правило, используется только методы параметрического представления и перекрывания. Поэтому работа Белооголовой А.М., посвященная неэмпирическим расчетам многоэлектронных эффектов в ФЭС несомненно является актуальной и оригинальной. В работе разработаны метод и программа расчета необходимых характеристик и проведено сравнение результатов теории с экспериментом, что подтвердило надежность предложенного подхода.

По автореферату имеются следующие замечания, которые, скорее всего, носят характер вопросов.

1. Не указано как рассчитывались матричные элементы (3) через перекрывание или через кулоновское взаимодействие
2. Интенсивности переходов рассчитываются по формуле (4), в которой нет энергетической зависимости. Могут ли результаты существенно поменяться при расчете вычетов по стандартной формуле метода функций Грина $f=1/(1-d\text{Re}\Sigma/dE)$.

3. В таблице 6 интенсивность основной линии C1s составляет 0.77, а интенсивности всех рассчитанных переходов 5p-электрона составляют всего 0.00162. Можно ли данным методом рассчитать также монополярные shake-up и shake-off сателлиты, забирающие существенную часть интенсивности линии C1s?
4. Методы расчета многоэлектронных эффектов в ФЭС для молекул и атомов во многом аналогичны, причем согласие результатов последних с экспериментом не вызывает сомнений. Однако, судя по автореферату, в работе нет сравнительного анализа этих подходов.

Серьезных замечаний ни по выбору темы работы, ни по методике ее выполнения, которые бы повлияли на общую, несомненно, положительную оценку работы в целом, у нас нет.

Насколько можно судить по автореферату, работа Белоголовой А.М. полностью отвечает всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в соответствии с Положением о присуждении ученых степеней, утвержденных Правительством Российской Федерации. Подчеркнем соответствие темы обсуждаемой диссертации и полученных в ней результатов по химической отрасли наук и специальности 1.4.4 – физическая химия, а также соответствие работы пункту 9 Положения о присуждении ученых степеней. Полагаем, что Белоголова А.М. достойна присвоения ученой степени кандидата наук по указанной выше специальности.

Яржемский Виктор Георгиевич
доктор физико-математических наук (01.04.07) ведущий научный сотрудник
лаборатории квантовой химии ИОНХ РАН (8 495 954-22-30), vgyar@igic.ras.ru

Долин Сергей Петрович
кандидат химических наук (02.00.04) заведующий лабораторией квантовой химии
ИОНХ РАН (8 495 955-48-20), dolin@igic.ras.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки - Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН).
119991 Москва, Ленинский проспект 31.
(тел. 8 495 952-07-87; факс. 8 495 954-12-79; e-mail. info@igic.ras.ru; сайт. <http://www.igic.ras.ru>).

Подпись руки
УДОСТОВЕРЯЮ
Зав. протокольным
отд. ИОНХ РАН

