

## Отзыв

на автореферат диссертации Александры Максимовны Белоголовой "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

Моделирование процессов отрыва / присоединения электрона к относительно стабильным молекулярным системам из первых принципов и прогнозирование свойств образующихся при этом объектов необходимо для развития многих областей фундаментальной науки и технологии, включая плазмохимию, астрохимию, биофотохимию, исследование взаимодействий излучения с веществом и радиационных повреждений, фотоэлектронную спектроскопию и т.д. В то же время точность моделирования заметно отстает от современных потребностей. В наибольшей степени это относится к процессам с образованием состояний, вложенных в континуум. В связи с этим работа А.М. Белоголовой, целью которой была разработка эффективных средств компьютерного моделирования ионизации / прилипания электрона и расчета характеристик получаемых продуктов в рамках формализма одночастичных пропагаторов, а также исследование надежности и точности и возможной области применения новых подходов, представляется чрезвычайно актуальной.

Основой для разработок диссертанта послужила техника представления промежуточных состояний (ISR) в рамках алгебраического диаграммного подхода (ADC) к конструированию одночастичного пропагатора, открывающая перспективы прогнозирования не только собственно характеристик процессов отрыва / прилипания электрона, но и разнообразных свойств получаемых молекулярных систем. Развита группа новых расчетных методов и выполнена их программная реализация. На основе огромного количества численных экспериментов для разнородных задач — от определения энергетических эффектов изменения числа электронов в простых системах, для которых возможно решение задачи полного конфигурационного взаимодействия, до анализа электронной структуры комплекса с присоединенным электроном в реакции ферментативной репарации фотоповреждений ДНК и моделирования спектров ионизации "релятивистских" систем, включающих атомы тяжелых элементов — доказана эффективность разработанных диссертантом методов и определена их область применимости. Следует особо выделить раздел диссертации, посвященный расчету положений и ширин анионных молекулярных резонансов, для которого была использована предложенная и реализованная А.М. Белоголовой комбинация метода ADC/ISR с техникой комплексных абсорбирующих потенциалов (CAP). Надежность расчетов этих характеристик до сих пор оставляла желать лучшего, и с учетом роли, которую играют процессы с участием анионных резонансов, в их числе диссоциативное прилипание электронов, в физике и химии низкотемпературной плазмы, значение рассматриваемого исследования трудно переоценить. В целом результаты работы А.М. Белоголовой создают возможность качественного повышения уровня точности и надежности описания рассматриваемого класса процессов и их продуктов, в том числе и для весьма сложных систем, тем самым способствуя значительному расширению области применения прогностического моделирования *ab initio* в физической химии и химической физике.

Все существенные результаты работы опубликованы, причем основной материал представлен в очень авторитетных международных изданиях.

Возможно, в автореферате было бы уместно прямое сопоставление эффективности новых подходов и их ближайших конкурентов — метода связанных кластеров / уравнений движения и, применительно к резонансным состояниям, техники стабилизационных графов с действительными стабилизирующими потенциалами. На мой взгляд, неудачна формулировка в последнем выводе: “показано, что нерелятивистские правила отбора по пространственной и спиновой симметрии могут нарушаться в системах, содержащих тяжелые атомы”. Я полагаю, что установлен не этот общеизвестный факт, а масштабы указанных нарушений в исследованных ионизационных спектрах.

Рассматриваемая диссертация представляет собой цельное научное исследование, выполненное на очень высоком профессиональном уровне. Работа полностью соответствует обозначенной в автореферате специальности 1.4.4. Физическая химия и удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней. Автор работы, Александра Максимовна Белоголова, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по этой специальности.

Главный научный сотрудник  
химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова  
доктор физ.-мат. наук

09.08.2021

А.В.Зайцевский



Зайцевский Андрей Вениаминович  
ученая степень: доктор физико-математических наук, 02.00.17 - математическая и квантовая химия  
ученое звание: старший научный сотрудник (доцент по специальности)  
главный научный сотрудник кафедры лазерной химии химического факультета  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
119991, Москва, Ленинские горы, 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет  
тел. +7 495 939 2825, email: zaitsevskii\_av@pnpi.nrcki.ru