

## **ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ**

о соискателе ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 1.4.4 - физическая химия  
**Белоголовой Александре Максимовне**

Белоголова А.М. обучалась в очной аспирантуре ФГБУН «Иркутский институт химии им. А. Е. Фаворского СО РАН» по специальности 1.4.4 – физическая химия (сентябрь, 2017 – июль, 2021), куда поступила закончив с отличием магистратуру физического факультета ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет». Ее диссертационная работа «Методы электронного пропэгатора для изучения молекулярных состояний, образующихся при отрыве и присоединении электрона» была выполнена в лаборатории неопределенных гетероатомных соединений в рамках фундаментальных исследований, проводимых в Иркутском институте химии им. А. Е. Фаворского СО РАН.

Актуальность выполненной работы обусловлена, прежде всего, важной ролью, которую играют процессы, связанные с отрывом и присоединением электрона в химии, биохимии, науках о материалах, физико-химии атмосферы и экологии. Высокая реакционная способность и короткоживущий характер образующихся частиц (ионов и радикалов) обуславливает необходимость применения для их изучения подходящих теоретических методов, которые, однако, до сих пор развиты сравнительно слабо. Основная часть диссертационного исследования Белоголовой А.М. посвящена разработке группы новых методов для расчета характеристик молекулярных состояний, образующихся в результате отрыва и присоединения электрона, основанных на теории одночастичной функции Грина (электронного пропэгатора) и приближениях ADC/ISR.

В работе выполнена первая программная реализация ряда различающихся уровнем приближений схем IP/EA-ADC/ISR и CAP-ADC и проведена оценка их точности. Следует отметить, что созданное при этом совместно с группой А. Дройва (Институт научных вычислений Гейдельбергского университета, Германия) программное обеспечение вошло в квантовохимический программный комплекс Q-Chem (версия 5.4 от 17 мая 2021) и стало уже сегодня доступным тысячам пользователей программы Q-Chem по всему миру. Еще одним практически значимым результатом проделанной диссертантом работы является создание массива реперных данных по методу полного конфигурационного взаимодействия (FCI), который, как можно предвидеть, будет востребован для изучения точности других квантовохимических методов расчета свойств молекулярных состояний с оторванным и присоединенным электроном.

Принципиально новым в научном плане результатом Белоголовой А.М. является открытие ранее не обсуждавшегося в фотоэлектронной спектроскопии явления, схожего с синглет-триплетными переходами в спектрах возбуждений, и состоящего в переходах в кватерные и иные запрещенные симметричными правилами

отбора сателлитные состояния при наличие в молекуле тяжелых элементов, для которых могут иметь место релятивистские (спин-орбитальные) эффекты. Другими составляющими научной новизны работы являются расчет и интерпретация с использованием разработанных методов недавно полученных спектров ионизации гальвиноксильного радикала и молекулы  $\text{CH}_3\text{I}$ , а также первое подтверждение на основании высокоуровневых неэмпирических расчетов важного в теоретическом и прикладном плане факта локализации электронной плотности присоединенного электрона на тиминовом фрагменте в комплексе, через который осуществляется ферментативная репарация поврежденных образованием (6-4) тимин-тиминовых димеров молекул ДНК.

Большая часть результатов работы Белоголовой А.М. опубликована в пяти статьях, вышедших в международных журналах *J. Chem. Phys.* и *J. Phys.: Conf. Ser.*, вместе с результатами с коллег, которые также принимали участие в совместных теоретических и экспериментальных исследованиях. Личный вклад Белоголовой А.М. в данные публикации состоял главным образом в разработке первых версий программ по методам IP/EA-ADC/ISR и CAP-ADC, проведении расчетов по ним, всестороннем изучении свойств метода CAP-ADC, наработке массива данных по методу FCI, изучении спектров ионизации галогенопроизводных метана и влияния спин-орбитального взаимодействия на интенсивности фотоэлектронных сателлитов. Кроме того, она принимала участие в обработке и интерпретации результатов, формулировке выводов и подготовке публикаций.

Белоголова А.М. является держателем личного гранта РФФИ № 19-33-90213 ("Аспиранты", 2019-2021 гг.) и исполнителем текущих и закончившихся грантов РФФИ (№ 19-03-00947 А) и РНФ (№ 19-73-10063, № 18-73-10080). Она активно участвует в работе конференций, выступая с устными и стендовыми докладами. В 2019 году на XXXI симпозиуме "Современная химическая физика" Александра Максимовна была награждена дипломом за лучшую работу молодого ученого. Кроме того, Белоголова А.М. является лауреатом конкурсов проектов молодых ученых ИрИХ СО РАН 2017 и 2019 годов, а также была удостоена стипендий Губернатора Иркутской области и Правительства Российской Федерации.

Все это демонстрирует, что Белоголова А.М. сумела стать специалистом высокой квалификации, на фундаментальном уровне владеющим теорией пропагаторных методов, а также технологиями их программной реализации. Она в совершенстве освоила стандартные методы квантовой химии, научившись применять их для решения разнообразных задач современной физической химии. При выполнении диссертационной работы она подтвердила, что может самостоятельно проводить научные исследования, начиная с постановки задачи и сбора литературных данных и заканчивая анализом результатов и формулировкой выводов.

А.М. Белоголову отличает увлеченность наукой (которой она занимается со второго курса университета), инициативность и, в хорошем смысле, азартность в проведении исследований. В то же время, она обладает рациональным, трезвым и взвешенным взглядом на вещи. Ей присущи обдуманный подход к выполнению заданий и оптимальность действий, основанные на умении задавать вопросы и разбираться в подробностях выполняемой работы. Кроме того, она умеет в нужный момент аргументированно возражать и критиковать. Все это делает Александру Максимовну не только хорошим исполнителем, но и по-настоящему полезным партнером по исследованиям.

Считаю, что Белоголова А.М. по уровню своей научной подготовки и профессиональных навыков, а также уровню выполненной диссертационной работы заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Научный руководитель



**Трофимов Александр Борисович**

доктор химических наук, профессор РАН, ведущий научный сотрудник лаборатории неопределенных гетероатомных соединений ФГБУН «Иркутский институт химии им. А. Е. Фаворского СО РАН» (664033, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1).

Телефон: 89025138954. Эл. почта: abtrof@mail.ru

08.06.2021

Отзыв Трофимова А.Б. заверяю



**Комарова Татьяна Николаевна**

кандидат химических наук, секретарь ученого совета ФГБУН «Иркутский институт химии им. А. Е. Фаворского СО РАН»

