

**Заключение диссертационного совета МГУ.014.3**  
**по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

**Решение диссертационного совета от «03» ноября 2023 г. № 160**

О присуждении Бойченко Антону Николаевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация: «Развитие методов моделирования процессов электронной эмиссии при фотовозбуждении молекулярных анионов» по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки) принята к защите диссертационным советом 29.09.2023, протокол № 154.

Соискатель Бойченко Антон Николаевич 1994 года рождения в 2022 году окончил очную аспирантуру химического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Соискатель работает младшим научным сотрудником в лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Диссертация выполнена в лаборатории квантовой фотодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук Боченкова Анастасия Владимировна, доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова.

Официальные оппоненты:

- Трофимов Александр Борисович, доктор химических наук, профессор, Иркутский государственный университет, лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем, ведущий научный сотрудник;
- Зайцевский Андрей Вениаминович, доктор физико-математических наук, доцент, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра лазерной химии, главный научный сотрудник;
- Медведев Эмиль Самуилович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр химической физики и медицинской химии РАН, теоретический отдел, главный научный сотрудник

дали положительные отзывы о диссертации.

Соискатель имеет 6 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 5 работ, из них 5 статей в международных рецензируемых журналах, индексируемых в базах

данных Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»:

1. C.S. Anstöter, G. Mensa-Bonsu, P. Nag., M. Ranković, R. Kumar T.P., **A.N. Boichenko**, A.V. Bochenkova, F. Juraj, J.R.R. Verlet. Mode-Specific Vibrational Autodetachment Following Excitation of Electronic Resonances by Electrons and Photons // Physical Review Letters – 2020. – V. 124. – P. 203401-1- 203401-6. (0.6 п.л., вклад Бойченко А.Н. составляет 50%, JIF WoS 8.6).

2. O.Tau, A. Henley, **A.N. Boichenko**, N.N. Kleshchina, R. Riley, B. Wang, D. Winning, R. Lewin, I.P. Parkin, J. M. Ward, H.C. Hailes, A.V. Bochenkova, H.H. Fielding. Liquid-microjet photoelectron spectroscopy of the green fluorescent protein chromophore // Nature Communication – 2022. – V.13, № 1 P. 507-514. (0.9 п.л., вклад Бойченко А.Н. составляет 50%, JIF WoS 16.6).

3. K. Robertson, W.G. Fortune, J. A. Davies, **A. N. Boichenko**, M.S. Scholz, O. Tau, A. V. Bochenkova, H. H. Fielding. Wavelength dependent mechanism of phenolate photooxidation in aqueous solution // Chemical Science – 2023. – V. 14. – P. 3257–3264. (1 п.л., вклад Бойченко А.Н. составляет 50%, JIF WoS 8.4).

4. **A.N. Boichenko**, A.V. Bochenkova. Accurate Vertical Electron Detachment Energies and Multiphoton Resonant Photoelectron Spectra of Biochromophore Anions in Aqueous Solution // Journal of Chemical Theory and Computation – 2023. – V.19. – P. 4088–4099. (1.6 п.л., вклад Бойченко А.Н. составляет 80%, JIF WoS 5.5).

5. **А.Н. Бойченко**, А.В. Боченкова. Расчет энергии вертикальной ионизации биологических хромофоров в водном окружении на основе многоконфигурационной теории возмущений // Журнал физической химии – 2023. – Т. 97, С. 559-564. (0.4 п.л., вклад Бойченко А.Н. составляет 80%, импакт-фактор РИНЦ 0.740).

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все они *положительные*.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области квантовой и физической химии, теоретической спектроскопии, а также наличием публикаций в высокорейтинговых международных журналах по темам, связанным с предметом диссертационного исследования.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой автором разработан единый подход для получения количественных оценок первого и последующих потенциалов отрыва электрона с молекулярных анионов как в газовой, так и конденсированной фазе, а также для описания различных каналов электронной

эмиссии в этих системах. На основании проведенных автором теоретических исследований выявлены общие закономерности процессов колебательной автоэмиссии электронов из диполь-связанных состояний молекулярных анионов в газовой фазе; установлена роль электронно-возбужденных состояний анионов при электронной эмиссии и фотоиндуцированном переносе электрона на растворитель; установлен механизм фотоокисления фенолят-аниона в водном растворе в зависимости от длины волны возбуждения.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

- 1) Структурированные низкоэнергетические сигналы в фотоэлектронных спектрах анион-радикала нитробензола в широком интервале энергий возбуждения обусловлены колебательной автоэмиссией из диполь-связанного состояния с потерей одного колебательного кванта. Колебания, активные в этом канале, могут быть идентифицированы по ИК-спектрам нейтрального молекулярного остова.
- 2) Разработанная методика расчета энергий вертикального отрыва электрона с хромофоров в растворе на основе многоконфигурационной теории возмущений ХМСQDPT2 в сочетании с методом потенциалов эффективных фрагментов обеспечивает надежные количественные оценки низших потенциалов отрыва электрона с гидратированных органических и биологических хромофоров, при этом учет поляризационного вклада растворителя является важным.
- 3) Предложенный подход к расчету фотоэлектронных спектров молекулярных анионов в растворе при резонансном двухфотонном возбуждении с учетом неравновесной заселенности колебательных уровней в промежуточном электронно-возбужденном состоянии позволяет предсказывать положение и ширину спектральных полос в зависимости от энергии возбуждения.
- 4) В водном растворе преобладает резонансно усиленный многофотонный отрыв электрона с анионного хромофора зеленого флуоресцентного белка, при этом ключевым является одноэлектронный канал распада из промежуточных электронно-возбужденных состояний аниона.
- 5) Фотоокисление фенолят-аниона в водном растворе с переносом электрона на растворитель приводит к образованию феноксильных радикалов как в основном, так и возбужденном состояниях в зависимости от длины волны возбуждения.

На заседании 03.11.2023 диссертационный совет принял решение присудить Бойченко А.Н. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4 – «физическая химия» (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 15, «против» – 0, «недействительных бюллетеней» – 0.

Председатель диссертационного совета,  
д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета  
к.х.н., доцент

Шилина М.И.

03.11.2023