

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Бойченко Антона Николаевича на тему: «Развитие методов моделирования процессов электронной эмиссии при фотовозбуждении молекулярных анионов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия

Диссертационная работа Бойченко Антона Николаевича посвящена развитию и приложениям **новых** теоретических подходов, позволяющих изучать сложные многоступенчатые процессы фотоиндуцированного переноса электронов в органических и биологических системах, в том числе с учетом влияния сольватного окружения. Основное внимание в работе уделяется процессам электронной эмиссии молекулярных анионов, тем не менее показано, что разработанный оригинальный подход универсален и может быть успешно применен для рассмотрения процессов в исходно нейтральных системах, что открывает доступ к решению широкого круга разноплановых спектроскопических задач и тем самым повышает **значимость и актуальность** работы. Развиваемый подход в полной мере отвечает современным запросам к квантовохимическим расчетам по интерпретации результатов экспериментов в области фотоэлектронной спектроскопии, при этом **значимость** диссертационного исследования в большой мере обусловлена тем, что предложенная методика позволяет получать количественные оценки.

Считаю, что суть работы достаточно ясно и последовательно изложена в автореферате, тем не менее у меня возникло несколько вопросов и замечаний:

- Рассчитанное в работе значение энергии связи диполь-связанного состояния нитробензола очень мало и варьируется в пределах от 6 до 10 мэВ в зависимости от геометрической конфигурации молекулярного остова, каково соотношение этой величины со средней ошибкой используемого метода?

- Для фенолят иона и РУР расчет на уровне PBE0/(aug)-cc-pVDZ/EFP с сольватной сферой радиусом 40 Å позволяет получить величину VDE эквивалентную расчету ХМСQDPT2/EFP с сольватной сферой того же радиуса. В чем преимущество использованного в работе более ресурсоемкого подхода?

Не смотря на наличие некоторых вопросов, считаю, что диссертационное исследование Бойченко А.Н. по своей актуальности, научной и практической значимости и новизне в полной мере соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова», а ее автор Бойченко А.Н. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Канд. хим. наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, старший научный сотрудник Лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет»



Скитневская Анна Дмитриевна

24 октября 2023 г.

Почтовый адрес места работы: 664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, д. 1, ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет», Лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем.

E-mail:

Подпись сотрудника Лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ИГУ А.Д. Скитневской удостоверяю:

