

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 методов моделирования процессов электронной эмиссии при фотовозбуждении из молекулярных анионов. Фотоиндуцированный перенос электрона играет ключевую роль в различных процессах фотохимии, фотобиологии, плазмохимии, радиоцционной химии. В настоящее время механизмы образования и релаксации метастабильных электронных состояний, являющихся ключевыми в захвате электрона нейтральной молекулой, а также динамика молекулярных систем в резонансных состояниях изучаются с помощью фотоэлектронной спектроскопии молекулярных анионов в газовой и конденсированной фазе. Необходимые для интерпретации фотоэлектронных спектров данные могут быть получены только посредством теоретических расчетов в рамках квантовохимических методов высокого уровня точности. В диссертационной работе Бойченко А.Н. были разработаны новые подходы к расчету энергии вертикальной ионизации анионных биологических хромофоров в конденсированной фазе, а также к оценке энергии связи невалентных слабосвязанных состояний молекулярных анионов в газовой фазе на основе расширенной квазивыврожденной теории возмущений второго порядка в варианте ХМСQDPT2. Представлены результаты пилотных приложений разработанных подходов к органическим анионам и анион-радикалам (анион-радикал нитробензола, фенолят-анион, анионные хромофоры фотоактивных белков). Таким образом диссертационная работа является **актуальной и значимой** с фундаментальной точки зрения. Помимо фундаментальной значимости, результаты работы могут быть использованы для решения важных прикладных задач – задач биоимиджинга и создания биологических сенсоров с заданными свойствами.

Диссертационная работа Бойченко А.Н. выполнена на высоком

исследовательском уровне с использованием широкого спектра современных методов теоретической химии. Достоверность и надежность полученных в диссертационной работе результатов гарантируется применением современных методов и хорошим согласием рассчитанных и экспериментальных результатов. Необходимо особо подчеркнуть, что полученные в работе теоретические результаты позволили получить исчерпывающую информацию об изучаемых системах.

Высокая значимость проделанной работы подтверждается публикацией ее результатов в 5 рецензируемых научных изданиях, в числе которых Nature Communications и Physical Review Letters - одни из самых престижных журналов в области физики.

Диссертационная работа Бойченко А.Н. по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствует критериям, определенными пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова», а ее автор Бойченко А.Н., несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

к.ф.-м.н. по специальности 1.3.3 – Теоретическая физика,
научный сотрудник Отдела квантовой физики и химии

Отделения перспективных разработок НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ

_____  Олейниченко Александр Витальевич

3 октября 2023 года

Почтовый адрес: Россия, 188300, Ленинградская обл., г.Гатчина, мкр. Орлова роща,
д. 1, НИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ
Электронная почта: oley_nichko_av@pnpi.nrcki.ru

ПОДПИСЬ РУКИ
ЗАВЕРЯЮ
НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА

03.10.23