

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сударьковой Светланы Михайловны
*«Строение и динамика незамещенных и фторированных биарильных систем в
электронновозбужденных состояниях»*,

представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»

Диссертационная работа С.М. Сударьковой посвящена исследованию процессов, происходящих в возбужденных состояниях некоторых простых органических молекул. Хотя подобные системы известны в фотохимии достаточно давно, далеко не для всех из них получены достаточно точные и надежные расчетные результаты. Более того, лишь для немногих из производных органических молекул такие результаты были получены. В то же время эти результаты необходимы для более детального понимания механизмов эволюции возбужденных состояний, в частности – для интерпретации имеющихся экспериментальных данных со сверхвысоким временным разрешением. Поэтому работа С.М. Сударьковой безусловно является актуальной.

В диссертации рассмотрены несколько типов молекул с двумя ароматическими циклами, соединенными мостиками различной длины, а также их фторированные производные. Наиболее интересным результатом работы является обнаружение альтернативных механизмов релаксации возбужденных состояний, возникающих в результате фторирования и зависящих от расположения атомов фтора. Нельзя также не отметить очень хорошее количественное согласие расчетных данных с имеющимися результатами спектроскопических исследований. Это обеспечено благодаря корректному использованию многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений. Очень полезна проведенная при этом С.М. Сударьковой сравнительная проверка возможностей нестационарного метода функционала плотности, широко и зачастую некритически применяемого вследствие гораздо меньшей его затратности. Эта проверка обнаружила трудности подбора такой

аппроксимации обменно-корреляционного функционала, которая была бы универсально надежна в рамках хотя бы одного типа рассмотренных несложных систем.

В целом, работа С.М. Сударьковой выполнена на высоком научном и методическом уровне, ее цели и задачи логично сформулированы, ясно и четко поставлены. Результаты работы, которые опубликованы в ведущих высокорейтинговых журналах (три статьи в журналах первой четверти), можно, несомненно, считать надежными. Тем не менее, знакомство с работой вызвало некоторые конкретные вопросы и замечания:

- 1) В работе упоминаются только синглетные возбужденные состояния, тогда как состояния более высокой мультиплетности, по-видимому, не рассматриваются. С чем это связано? Что известно об участии триплетных состояний в механизмах релаксации фотовозбуждений в таких системах?
- 2) Насколько важно использование в выполненных расчетах именно теории возмущений, нельзя ли было обойтись самим по себе многоконфигурационным методом самосогласованного поля?
- 3) Автор упоминает о полученных коллегами-экспериментаторами данных фемтосекундной спектроскопии, но, к сожалению, в автореферате я не нашел изображений спектров, которые могли бы представлять интерес читателю.

Указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. По своей актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований и важности полученных результатов представленная диссертационная работа полностью отвечает критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а Сударькова Светлана Михайловна достойна присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

доктор физико-математических наук,
руководитель отделения перспективных разработок и
заведующий лабораторией квантовой химии
Федерального государственного бюджетного учреждения
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
профессор кафедры квантовой механики физического факультета СПбГУ

Титов Анатолий Владимирович


13 ноября 2022.

Контактные данные:

Телефон: +7 (81371) 310-55

Электронная почта: titov_av@pnpi.nrcki.ru

Адрес места работы:

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, ФГБУ
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Подпись руки Титова А.В. заверяю:

14 НОЯ 2022




Ученый секретарь
Воробьев С.И.