

**Заключение диссертационного совета МГУ.014.3(МГУ.02.04)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

Решение диссертационного совета от 18.11.2022 г. №139.

О присуждении Сударьковой Светлане Михайловне, гражданке России, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Строение и динамика незамещенных и фторированных биарильных систем в электроновозбужденных состояниях» по специальности 1.4.4. «Физическая химия» принята к защите диссертационным советом 30.09.2022, протокол №121.

Соискатель Сударькова Светлана Михайловна 1994 года рождения, в 2017 году окончила химический факультет Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова и обучалась в аспирантуре химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова с 2017 по сентябрь 2021 г.

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

Диссертация выполнена на кафедре физической химии химического факультета.

Научный руководитель (консультант) – доктор физико-математических наук, доцент, Иоффе Илья Нафтольевич.

Официальные оппоненты:

1. доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Зайцевский Андрей Вениаминович;

2. доктор химических наук, профессор, Надточенко Виктор Андреевич, ФГБУН ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН ;

3. кандидат химических наук, Ананьев Иван Вячеславович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт Общей и Неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 10 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 3 работы, из них 3 статьи, опубликованные 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. Sudarkova S. M., Ioffe I. N. E/Z photoisomerization pathway in pristine and fluorinated di(3 furyl)ethenes // Physical Chemistry Chemical Physics – 2022. – V. 24. – P. 23749–23757; IF: 3.945 (Web of Science 2021)

2. Sudarkova S. M., Khinevich V. E., Ioffe I. N., Quick M., Kovalenko S. A. Substitution pattern dependent behavior of the singlet excited states in symmetrically fluorinated biphenyls // Physical Chemistry Chemical Physics – 2021. – V. 23. – P. 22067–22077; IF: 3.945 (Web of Science 2021)

3. Krohn O. A., Quick M., Sudarkova S. M., Ioffe I. N., Richter C., Kovalenko S. A. Photoisomerization dynamics of trans–trans, cis–trans, and cis–cis diphenylbutadiene from broadband transient absorption spectroscopy and calculations // Journal of Chemical Physics – 2020. – V. 152. – P. 224305; IF: 4.304 (Web of Science 2021)

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов был обусловлен тем, что они являются высококвалифицированными признанными специалистами в области квантовой химии и спектроскопии, в частности – в вопросах теоретической фотохимии, динамики возбужденных состояний и первопринципных многоконфигурационных расчетных методов, и являются авторами многочисленных публикаций в высокорейтинговых международных журналах по темам, связанным с предметом и методами диссертационного исследования.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является актуальной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором квантово-химических расчетов предложены возможные механизмы релаксации электроновозбужденных состояний низко- и глубокофторированных биарильных органических хромофоров, данные о которых могут использоваться в направленном конструировании молекулярных устройств с заданными фотохимическими и фотофизическими свойствами.

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. Введение атомов фтора в молекулы бифенила и 1,2-ди(3-фурил)этилена приводит к перестройке набора нижних возбужденных состояний, при которой могут возникать возбужденные состояния с зарядовой асимметрией и дополнительные координаты релаксации возбуждения.
2. Фотохимическая эволюция фторированных 1,2-ди(3-фурил)этиленов существенно зависит от мотива замещения, причем в высокофторированных молекулах может иметь место конкуренция транс/цис-изомеризации и пирамидализации фторированного центра в фурильном цикле.
3. Фотохимическая эволюция изомеров 1,4-дифенил-1,3-бутадиена в жидкой фазе происходит через однократно возбужденное синглетное состояние. При этом возможна перестановка нижних синглетных возбужденных состояний за счет эффектов среды.

На заседании 18.11.2022 года диссертационный совет принял решение присудить Сударьковой Светлане Михайловне ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них доктора(ов) наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия» физико-математические науки – 6 человек(а), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 15, «против» – 0, «недействительных бюллетеней» – 0.

Председатель совета,
д.х.н., доц.

Горюнков А. А.

Ученый секретарь совета,
к.х.н., доц.

Шилина М. И.