

## ОТЗЫВ

Научного руководителя о работе Сударьковой Светланы Михайловны «Строение и динамика незамещенных и фторированных биарильных систем в электроновозбужденных состояниях», представленной к защите на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Светлана Михайловна Сударькова пришла в лабораторию термохимии в 2015 году, во время обучения на 5 курсе химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова и работала с этого времени под моим руководством, окончив химический факультет МГУ с отличием и пройдя обучение в аспирантуре.

За время работы в лаборатории термохимии С. М. Сударькова освоила широкий диапазон современных методов квантово-химических расчетов. Она участвовала в работах по нескольким темам, связанным с различными типами молекулярных систем, что позволило ей приобрести разнообразный опыт и глубокое понимание расчетных исследований. Среди полученных С. М. Сударьковой результатов – выяснение механизмов каркасных перегруппировок, протекающих при хлорировании фуллеренов, а также описание динамики внутрисферных кластерных частиц внутри углеродных каркасов эндодральных фуллеренов. В рамках же настоящей диссертационной работы С. М. Сударькова исследовала динамику возбужденных состояний ряда базовых хромофорных систем, применяя к ним многоконфигурационные методы квантовой химии, в частности – многоконфигурационную теорию возмущений XMCQDPT2, а также нестационарный метод функционала плотности. Использование многоконфигурационных подходов потребовало от С. М. Сударьковой аккуратной методической работы по сопоставлению и подбору оптимальных активных и модельных пространств для тех или иных видов задач, с чем она успешно справилась.

В настоящей работе С. М. Сударькова исследовала особенности строения и релаксации нижних синглетных возбужденных состояний ряда биарильных молекул с различными типами арильных групп и соединяющего их мостика, а также с различными мотивами фторирования. С. М. Сударькова продемонстрировала характер изменения картины возбужденных состояний при фторировании ненасыщенных углеродных центров, появление альтернативных механизмов релаксации возбужденных состояний и проявление эффектов спонтанной поляризации. Кроме этого, были получены важные результаты в отношении границ применимости метода TDDFT в варианте линейного отклика даже к неполярным состояниям сравнительно простых систем, а также возможных ошибок данного метода. Достоверность полученных результатов обеспечивается применением современных методов теоретической химии. Кроме того, выполненные исследования были осуществлены в сотрудничестве с группой сверхбыстрой спектроскопии Гумбольдтовского университета г. Берлина, что позволило показать

согласие теоретических предсказаний и экспериментальных наблюдений. Результаты, полученные в рамках диссертационной работы, были опубликованы в 3 статьях в международных журналах (WoS/Scopus) и доложены на 3 международных и всероссийских конференциях.

Во время работы в лаборатории термохимии С. М. Сударькова являлась исполнителем ряда грантов РФФИ и РНФ, проходила стажировки в Лейбницевском институте физики и химии твердого тела и материалов г. Дрездена. Она имеет опыт участия в педагогической деятельности, включая руководство студенческими работами. В целом, С. М. Сударькова является опытным, знающим, вдумчивым, аккуратным и самостоятельным исследователем, хорошо осведомленным в современном состоянии теоретической и физической химии.

Как научный руководитель я полагаю, что представленная С. М. Сударьковой к защите диссертационная работа является законченным научным исследованием, отвечающим требованиям п.п. 2.1-2.5 "Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова", выдвигаемых к работам, представляемым на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель  
профессор кафедры физической химии  
химического факультета ФГБОУ ВО  
«Московский государственный университет  
имени М.В. Ломоносова», д.ф.-м.н., доцент  
по специальности «Физическая химия»

  
И.Н. Иоффе  
Тел.: +7 (495) 939-53-73

7 сентября 2022

г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

