

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сударьковой Светланы Михайловны «Строение и динамика незамещенных и фторированных биарильных систем в электроновозбужденных состояниях», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 — Физическая химия

Фотоиндуцируемые химические превращения органических хромофоров лежат в основе множества биохимических процессов и издавна привлекают внимание химиков, стремящихся достичь сопоставимой эффективности и селективности синтетических методик. В число актуальных задач входит, например, создание молекулярных переключателей, в которых при поглощении кванта света может происходить направленное изменение конфигурации молекулы и/или ее электронных свойств. Например, облучение биарилэтиленов и азобензолов при определенных длинах волн может приводить к направленной *цис-транс*-изомеризации или циклизации и ретроциклизации. Такие процессы находят применение при создании т.н. «умных» материалов, чьи свойства могут быть переключены внешним воздействием.

Для направленного дизайна подобных объектов необходимо понимание механизмов фотоиндуцируемых процессов, поведения участвующих в них возбужденных состояний. Удивительно, но и для таких основополагающих систем, как биарилы, диарилэтилены и -полиены во многих случаях нет достаточных данных о том, как могут повлиять на фотохимические процессы даже довольно простые варианты химического замещения. Поэтому диссертационная работа С.М. Сударьковой, посвященная квантово-химическому моделированию подобных систем на высоком расчетном уровне является актуальной и интересной для широкого круга исследователей. Это подтверждается наличием публикаций автора в ведущих зарубежных рецензируемых журналах и сообщений на представительных научных конференциях.

Автореферат диссертации дает четкое представление о цели и задачах исследования, использованных расчетных подходах. Подробно описаны основные этапы и результаты работы. Хочется подчеркнуть тщательность выполненного теоретического исследования и серьезное отношение к верификации расчетных результатов с использованием экспериментальных данных, полученных в сотрудничестве с зарубежной исследовательской командой методами фемтосекундной спектроскопии. В работе были впервые показаны эффекты спонтанной поляризации возбужденных состояний в некоторых фторзамещенных бифенилах, описаны особенности фотоизомеризации 1,2-ди(3-фурил)этиленов и конкурирующих направлений их релаксации в зависимости от

фторирования, детально рассмотрено поведение нижних возбужденных состояний 1,4-дифенил-1,3-бутадиена. Кроме того, были получены полезные сведения о степени достоверности в отношении рассмотренных систем метода TDDFT, служащего для многих основным расчетным инструментом исследования возбужденных состояний.

Имеется лишь одно незначительное техническое замечание. Для удобства читателя стоило привести структурные формулы исследуемых молекул перед обсуждением результатов (как, например, на рис. 2). Отчасти это недостаток компенсируется высоким качеством рисунков с изображением МО, см. рис. 1, 5 и т.д.

Отмеченное замечания носит уточняющий характер и не снижает общей положительной оценки работы С.М. Сударьковой. Оценивая объем и содержание проведенных исследований, новизну полученных результатов и обоснованность сделанных выводов, можно заключить, что диссертационная работа «Строение и динамика незамещенных и фторированных биарильных систем в электроновозбужденных состояниях» имеет фундаментальный характер и является завершенным научным исследованием, которое по своей актуальности, научной новизне и практической значимости соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а её автор Сударькова Светлана Михайловна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

10.11.2022

Отзыв составил

доктор физико-математических наук,

ведущий научный сотрудник

ФБГУН Институт физики молекул и

кристаллов УФИЦ РАН, 450075, г. Уфа,

пр. Октября, 151

Телефон: +7(347) 292-14-17

nail@anrb.ru

Подпись заверяю

Ученый секретарь ИФМК УФИЦ РАН, к.ф.-м.н.



Асфандиаров Наиль Лутфурахманович

Бунаков А.А.