

## ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Сударьковой С.М. посвящена исследованию возбужденных состояний и фотохимических процессов в биарильных системах. Изучено влияние фторных заместителей и длины алкенового мостика между арильными кольцами на структуру нижних возбужденных состояний и структурную трансформацию молекулы в возбужденных состояниях. Основная часть исследования состоит в теоретическом описании экспериментальных данных, полученных с использованием фемтосекундных методов, и предсказании фотодинамики молекул. Рассмотренные в работе системы представляют интерес при разработке различных оптически активных элементов устройств молекулярной электроники, а также для проведения специфических фотохимических реакций. Детальное исследование фотоиндуцированных превращений рассмотренных в работе систем является актуальной задачей как с точки зрения развития квантово-химических подходов расчета возбужденных систем, так для интерпретации экспериментальных данных и определения вектора синтетических работ для получения молекул с требуемыми характеристиками.

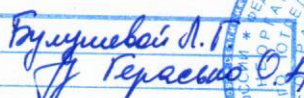
Сударьковой С.М. выполнен большой объем методической работы по определению влияния размера модельного пространства теории возмущений на энергию электронных переходов, определены возможности нестационарного метода функционала электронной плотности для описания фотоиндуцированных превращений фторированных биарильных молекул, получены новые интересные данные об особенностях поверхностей потенциальной энергии их фторпроизводных, о поляризуемости некоторых из этих молекул в возбужденном состоянии. Продуманный выбор объектов и стратегии исследования, использование в работе экспериментальных спектров, полученных на оборудовании мирового уровня, достижение очень хорошего соответствия рассчитанных величин экспериментальным, грамотный анализ полученных результатов являются основой достоверности полученных в работе данных.

Высокий уровень результатов работы подтверждается их публикацией в высокорейтинговых профильных журналах и представлением на нескольких международных научных конференциях. По своей актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований и значимости 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 хим. наук, главный научный сотрудник лаборатории физикохимии наноматериалов  
ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
630090 г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д.3  
Тел. +7(383)330-53-52; e-mail: bul@niic.nsc.ru

Булусева Любовь Геннадьевна

11 ноября 2022 г.

Подпись Булусевой Л.Г.  
заверяю   
Ученый секретарь ИНХ СО РАН  
" 11 " 11 2022

