

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

Решение диссертационного совета от «9» декабря 2022 г. № 143

О присуждении Сызганцевой Марии Алексеевне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Влияние модификации электронной структуры металл-органических каркасов на времена излучательной и безызлучательной электрон-дырочной рекомбинации по специальности 1.4.4. – «Физическая химия» принята к защите диссертационным советом 28 октября 2022 года, протокол № 137.

Соискатель Сызганцева Мария Алексеевна, 1995 года рождения, в 2022 году окончила очную аспирантуру химического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

В настоящее время соискатель не работает.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Степанов Николай Фёдорович, ведущий инженер кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

- Колесников Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», физический факультет, отделение экспериментальной и теоретической физики, кафедра общей физики, доцент,
- Исаева Вера Ильинична, доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН), Лаборатория разработки и исследования полифункциональных катализаторов № 14, ведущий научный сотрудник,
- Витковская Надежда Моисеевна, доктор химических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет», Лаборатория квантовой химии ИГУ, Зав. лабораторией квантовой химии

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 6 работ, из них 6 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. – «Физическая химия»:

1. **Syzgantseva M.A.**, Stepanov N.F., Syzgantseva O.A. Carrier lifetimes and recombination pathways in metal-organic frameworks // Journal of Physical Chemistry Letters.— 2019.— Vol. 10, № 17.— P. 5041–5046. (Импакт-фактор WoS 6,475)

2. **Syzgantseva M.A.**, Ireland C.P., Ebrahim F.M., Smit B., Syzgantseva O.A. Metal Substitution as the Method of Modifying Electronic Structure of Metal–Organic Frameworks // Journal of the American Chemical Society.— 2019.— Vol. 141, № 15.— P. 6271–6278. (Импакт-фактор WoS 16,383)

3. **Syzgantseva M.A.**, Stepanov N.F., Syzgantseva O.A. Computing the effect of metal substitution in metal–organic frameworks on the recombination times of charge carriers // Journal of Physical Chemistry C.— 2020.— Vol. 124, № 44.— P. 24372–24378. (Импакт-фактор WoS 4,126)

4. **Syzgantseva M.A.**, Stepanov N.F., Syzgantseva O.A. Band alignment as the method for modifying electronic structure of metal-organic frameworks // ACS applied materials & interfaces.— 2020.— Vol. 12, № 15.— P. 17611–17619. (Импакт-фактор WoS 9,229)

5. **Syzgantseva M.A.**, Stepanov N.F., Syzgantseva O.A. Effect of ligand functionalization on the rate of charge carrier recombination in metal–organic frameworks: A case study of MIL-125 // Journal of Physical Chemistry Letters.— 2021.— Vol. 12.— P. 829–834. (Импакт-фактор WoS 6,475)

6. **Syzgantseva M.A.**, Syzgantseva O.A. Efficient Computation of Nonadiabatic Coupling Coefficients for Modeling Charge Carrier Recombination in Extended Systems: The Case of Metal–Organic Frameworks // Journal of Physical Chemistry A.— 2021.— Vol. 125, № 44.— P. 9700–9706. (Импакт-фактор WoS 2,944)

На диссертацию и автореферат поступило 4 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической и квантовой химии, молекулярной динамики, катализа, физики конденсированного состояния, химии металл-органических каркасов, а также большим количеством научных публикаций в соответствующих областях исследований.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание

ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований методами теоретической и вычислительной химии впервые смоделированы процессы электрон-дырочной рекомбинации в металл-органических каркасах (МОК) MIL-125 и UiO-66, вычислены времена жизни носителей заряда и выявлены доминирующие рекомбинационные каналы; предложен эффективный вычислительный протокол для моделирования электрон-дырочной рекомбинации в МОК; теоретически обоснованы пути изменения времен жизни носителей заряда в МОК.

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. Методы *ab initio* квантовой химии, в том числе нестационарная и стационарная теория функционала плотности, а также неадиабатическая молекулярная динамика, позволяют адекватно описать процессы излучательной и безызлучательной электрон-дырочной рекомбинации в металл-органических каркасных соединениях.

2. Передача энергии электронного возбуждения на колебательные степени свободы происходит как посредством высокочастотных колебаний, так и за счёт низкочастотных или мягких колебаний, причём низкочастотные колебания могут иметь большой вклад.

На заседании 9 декабря 2022 года диссертационный совет принял решение присудить Сызганцевой М.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 11, против – 2, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета
к.х.н., доцент

Шилина М.И.

09.12.22