**Заключение диссертационного совета МГУ.014.03(МГУ.02.04)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

Решение диссертационного совета от «18» ноября 2022 г. № 139

О присуждении Сударьковой Светлане Михайловне, гражданке РФ, 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» (физико-математические науки) принята к защите диссертационным советом 30.09.2022, протокол № 121.

Соискатель Сударькова Светлана Михайловна, 1994 года рождения, в 2021 году окончила аспирантуру химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

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

Диссертация выполнена в лаборатории термохимии кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент Иоффе Илья Нафтольевич, профессор кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

- Зайцевский Андрей Вениаминович, доктор физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», химический факультет, кафедра лазерной химии, главный научный сотрудник;

- Надточенко Виктор Андреевич, доктор химических наук, профессор, ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук», дирекция, директор;

- Ананьев Иван Вячеславович, кандидат химических наук, ФГБУН «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук», лаборатория квантовой химии, заведующий лабораторией

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 отзыва, 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 диссертационный совет принял решение присудить Сударьковой С.М. ученую степень кандидата физико-математических наук.

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

Председатель

диссертационного совета,

д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

к.х.н., доцент

Шилина М.И.

18.11.2022