

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ширяевой Анастасии Андреевны
«Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для
светоизлучающих и фотоэлектрических устройств»,
представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния

Диссертация Анастасии Андреевны Ширяевой посвящена установлению взаимосвязи между структурой и оптическими свойствами комплексов 3d-металлов на основе лигандов – оснований Шиффа и β -аминовинилкетон и экспериментальной проверке их функциональной пригодности в качестве активных слоёв органических светодиодов (OLED) и солнечных элементов, сенсibilизированных красителем (DSSC). Исследования в этом направлении актуальны и имеют высокую практическую значимость. В ходе работы определена кристаллическая структура и изучено электронное строение комплексов, изготовлены и протестированы прототипы OLED-устройств с эмиттерами на основе комплексов цинка(II) с основаниями Шиффа, а также лабораторные прототипы DSSC с использованием оснований Шиффа – производных глауцина – и комплексов цинка(II) в качестве сенсibilизаторов. Большой массив экспериментальных и расчётных данных позволил автору установить корреляции между структурными параметрами соединений и их оптоэлектронными характеристиками. Изготовление OLED, обладающих высокой яркостью порядка 1000 кд/м² при внешней квантовой эффективности 2.2%, является достойным достижением для лабораторных прототипов на основе новых материалов. Эффективность 5.18%, полученная в DSSC, также представляет собой обнадеживающий результат, открывающий перспективы для дальнейшего улучшения.

Установление влияния строения молекул комплексов на их оптические характеристики, анализ электронного строения комплексов экспериментальными и теоретическими методами, а также создание OLED и DSSC делают диссертацию А. А. Ширяевой соответствующей профилю специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Результаты диссертационной работы А. А. Ширяевой хорошо представлены в печати – они опубликованы в десяти статьях в профильных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных *Web of Science*, *Scopus* и *РИНЦ*, и в тезисах восьми докладов на международных и всероссийских конференциях.

По прочтении автореферата диссертации А. А. Ширяевой у меня возникли замечания, которые приводятся ниже.

1) В тексте автореферата встречаются неудачные формулировки, в качестве примеров которых можно привести следующие:

«Таким образом, установление связи между типом кристаллической решётки, природой металлического центра и функциональными свойствами материалов, что имеет критическое значение для целенаправленного дизайна новых оптоэлектронных устройств на основе исследования молекулярных кристаллов исследуемых соединений является актуальной темой.» – лучше было бы сказать «Таким образом, установление связи между типом кристаллической решётки, природой металлического центра и функциональными свойствами материалов имеет критическое значение для целенаправленного дизайна новых оптоэлектронных устройств.»;

«...рутениевых комплексов» – вариант «...комплексов рутения» представляется более строгим;

«Определить молекулярное, кристаллическое и электронное строения новых серий β -винилкетон, ...» – вариант «Определить молекулярное, кристаллическое и электронное строение новых серий β -винилкетон, ...» с термином «строение» в единственном, а не во множественном числе звучит более естественно для русского научного стиля.

2) Анализ данных, приведённых в автореферате, сильно затруднён отсутствием таблицы или списка с формулами исследуемых соединений. Проблема лишь отчасти смягчается приведением молекулярного строения ряда комплексов, установленного по данным рентгеноструктурного анализа, но, например, для соединений 8, 9, 12, 13 и 16 в автореферате не приводится вообще никаких данных.

3) Утверждение «Установлены универсальные корреляции «структура-свойство» и детально проанализированы ключевые физические процессы, определяющие эффективность устройств» содержит явное преувеличение, поскольку установленные в работе корреляции неизбежно ограничены кругом исследованных соединений и, таким образом, не могут быть универсальными.

4) Автор обосновывает актуальность работы потребностью в новых материалах для DSSC и OLED. В этом контексте не совсем ясна роль исследованных комплексов Cu(II), которые не являются типичными материалами для данных устройств и не применяются в роли таковых в данной работе.

Эти замечания к содержанию автореферата диссертации А. А. Ширяевой не снижают ценности и высокой практической значимости результатов исследования.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа Ширяевой Анастасии Андреевны на тему «Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств» отвечает требованиям «Положения о присуждении степеней ЮФУ» (Приказ № 230-ОД от 06.07.2026 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а её автор, Ширяева Анастасия Андреевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

Согласен на обработку моих персональных данных, связанных с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела Ширяевой А. А.

Марк Борисович Бушуев
Доктор химических наук (02.00.01 – неорганическая химия),
Ведущий научный сотрудник лаборатории
металл-органических координационных полимеров,
Институт неорганической химии им. А. В. Николаева
Сибирского отделения Российской Академии наук,
Проспект Академика Лаврентьева, 3,
г. Новосибирск, 630090
Тел. +7(383) 316 51 43
e-mail: bushuev@niic.nsc.ru

Подпись д.х.н. М. Б. Бушуева заверяю

Учёный секретарь

Института неорганической химии им. А. В. Николаева
Сибирского отделения Российской Академии наук,
Д. х. н. О. А. Герасько
09.09.2026

