

Отзыв

на автореферат диссертации Ширяевой Анастасии Андреевны
«Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов
для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств», представленной на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-
математические науки)

Диссертационная работа Ширяевой Анастасии Андреевны посвящена решению актуальной задачи современной физики конденсированного состояния – установлению фундаментальных взаимосвязей между кристаллической структурой, электронным строением и функциональными свойствами новых органических и координационных соединений на основе оснований Шиффа и β -аминовинилкетонов. Актуальность темы не вызывает сомнений, поскольку работа направлена на создание научной базы для целенаправленного дизайна доступных, стабильных и эффективных материалов для альтернативной энергетики (DSSC) и оптоэлектроники (OLED), что является одной из приоритетных задач научно-технического прогресса.

Проделана большая, трудоемкая работа, автором получены важные результаты. Наглядно продемонстрировано, что варьирование природы заместителей и типа металлического центра позволяет целенаправленно управлять структурой и оптическими свойствами соединений; при этом установлено, что ключевые фотофизические свойства комплексов $Zn(II)$ определяются координационным узлом $\{ZnN_4\}$ и не зависят от длины заместителя, тогда как супрамолекулярная упаковка, влияющая на эффективность электролюминесценции, чувствительна к этому параметру. Практическая значимость подтверждена созданием работающих прототипов: OLED на основе комплексов цинка демонстрируют синюю электролюминесценцию с внешней квантовой эффективностью до 2,2% и яркостью ~ 1000 кд/м², а органические сенсibilизаторы на основе глауцина обеспечивают эффективность преобразования энергии в DSSC до 5,18%. Достоверность выводов обеспечена комплексом современных экспериментальных методов в сочетании с квантово-химическим моделированием, согласованность результатов и публикации в рецензируемых журналах подтверждают высокую надёжность данных.

В качестве замечаний, не снижающих общей положительной оценки работы, можно отметить:

1. В тексте автореферата (стр. 13-14) при описании PCA и расчетов TD-DFT для комплексов 6 и 7 упоминается наличие d-d-полос и смешанных переходов, однако сами спектры этих комплексов не приведены, в отличие от комплекса 8. Это несколько затрудняет визуальное восприятие сравнительного анализа.

2. Хотя в выводах указано, что для всех соединений выполняются термодинамические условия инжекции в TiO_2 , в автореферате не приведены детальные данные по измерению уровней LUMO/HOMO электрохимическими методами, что было бы полезно для полноты картины.

Высказанные замечания не снижают общего высокого уровня исследования и не затрагивают достоверности и значимости достигнутых результатов.

Диссертационная работа Ширяевой Анастасии Андреевны на тему «Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для

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


_____ /Мирочник Анатолий Григорьевич
подпись

Подпись Мирочника А.Г. заверяю
Ученый секретарь Института химии ДВО РАН
К.Х.Н.

Маринин Д.В