

ОТЗЫВ

научного руководителя о **Ширяевой** Анастасии Андреевны, представившей диссертацию «Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств» на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Ширяева Анастасия Андреевна в 2017 году поступила на физический факультет Южного федерального университета, в 2021 году окончила с отличием бакалаврскую программу по направлению 03.03.02 «Физика», в 2023 году окончила с отличием обучение по магистерской программе 03.04.02 «Физика» и в том же году поступила на очную аспирантуру Южного федерального университета по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. В настоящее время Ширяева А. А. работает в отделе рентгеновской и электронной спектроскопии НИИ физики ЮФУ в должности младшего научного сотрудника.

Ширяева Анастасия Андреевна на протяжении 3-х лет проводила научные исследования под моим руководством в отделе рентгеновской и электронной спектроскопии НИИ физики ЮФУ. За время обучения она зарекомендовала себя как сложившийся, высококвалифицированный исследователь, способный самостоятельно решать комплексные научные задачи на стыке физики молекулярных кристаллов, рентгеновской спектроскопии и квантово-химического моделирования.

Анастасия Андреевна в полном объёме выполнила запланированный цикл экспериментальных и теоретических исследований. Ею изучены молекулярные кристаллы новых серий соединений на основе β -аминовинилкетонов, оснований Шиффа (включая гидроксильные производные с длиной цепи $(\text{CH}_2)_n\text{OH}$, $n=2-6$, а также глауцинсодержащие системы) и их координационных соединений с ионами Cu(II) и Zn(II) . В ходе работы аспирантка освоила и успешно применила широкий спектр

современных методов: монокристалльную рентгеновскую дифракцию (включая синхротронные измерения), рентгеновскую спектроскопию поглощения (анализ XANES/EXAFS), УФ-видимую и флуоресцентную спектроскопию, термогравиметрический анализ, циклическую вольтамперометрию, а также методы теории функционала плотности (DFT, TD-DFT).

К числу наиболее значимых результатов, полученных соискателем, следует отнести следующие. Впервые установлено, что введение метильной группы в β -аминовинилкетоны приводит к стерической деформации и нарушению копланарности, что управляет шириной запрещённой зоны и типом межмолекулярных взаимодействий. Для комплексов меди(II) впервые показано, что природа ароматического заместителя (хинолильный или нафтильный) определяет координационное число и геометрию узла Cu(II) – пентакоординационную квадратную пирамиду или плоско-квадратную. В ряду комплексов Zn(II) с гидроксильными лигандами обнаружено, что электронная структура и фотолюминесценция инвариантны к длине цепи, а супрамолекулярная упаковка переключается при $n \geq 3$ за счёт π – π -стэкинга. Для глауцинсодержащих систем впервые показано, что свободные лиганды превосходят комплексы Zn(II) в качестве сенситизаторов DSSC (КПД до 5.18%) из-за планарной архитектуры и внутрилигандного переноса заряда. Полученные результаты имеют фундаментальное значение для физики конденсированного состояния и молекулярной оптоэлектроники, а также практическую ценность для создания активных слоёв OLED и фотосенсибилизаторов DSSC.

Результаты диссертационного исследования отражены в 6 статьях в рецензируемых научных журналах из Перечня ВАК Минобрнауки РФ, 5 статьях – в научных изданиях, входящих в Scopus, Web of Science, RSCI, а также представлены в виде 10 докладов на всероссийских и международных конференциях (ВНКСФ, «Наука Юга России», «Химия: достижения и перспективы», LUMOS и др.).

За время работы в аспирантуре Анастасия Андреевна проявила себя как исключительно ответственный, трудолюбивый и критически мыслящий исследователь. Она обладает широкой научной эрудицией, глубокими знаниями в области физики конденсированного состояния, рентгеновской кристаллографии, спектроскопии и квантовой химии. Особо отмечу её аналитические способности: она умеет выделять ключевые закономерности из массивов экспериментальных данных, строить непротиворечивые модели и формулировать обоснованные научные положения.

В коллективе НИИ физики ЮФУ Ширяева А.А. пользуется заслуженным уважением коллег. Она проявляет высокую работоспособность, нацеленность на конечный результат, умение работать как самостоятельно, так и в составе исследовательской группы. К решению поставленных научных задач относится творчески, активно генерирует новые идеи и находит нестандартные подходы к их реализации. Дисциплинирована, добросовестна, владеет английским языком на уровне, достаточном для чтения научной литературы и подготовки публикаций.

Диссертационная работа Ширяевой А.А. «Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств» выполнена на высоком научном уровне и полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Основные научные результаты, полученные аспиранткой, обладают несомненной новизной и имеют важное значение для развития физики молекулярных кристаллов, оптоэлектронных материалов и альтернативной энергетики.

Считаю, что Ширяева Анастасия Андреевна является сложившимся, высококвалифицированным специалистом в области физики конденсированного состояния, способным самостоятельно вести научные исследования и решать сложные научно-технические задачи. По уровню профессиональной подготовки, объёму и качеству выполненной работы, а

« 21 » мар 2026
Г.

ДОК

Личную подпись Власенко В.Г. удостоверяю:

Директор НИИ физики ЮФУ

Вербенко Илья Александрович

« 01 » мая 2026 г.

