

ПРОТОКОЛ № 2

заседания диссовета **ЮФУ801.01.20** по физико-математическим наукам, по двум специальностям 1.3.8. и 1.3.20. на базе НИИ физики Южного федерального университета по результатам экспертизы диссертации

Ширяевой Анастасии Андреевны на тему:

«Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств»,
представленной к защите на соискание ученой степени **кандидата** физико-математических наук по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния**,
и **приёму** её к защите от **08.07.2026**

ПРИСУТСТВУЮТ: члены диссовета ЮФУ801.01.20:

1. Тер-Оганесян Никита Валерьевич, доктор физико-математических наук, 1.3.8.;
(председатель Совета)
2. Козаков Алексей Титович, доктор физико-математических наук, профессор, 1.3.20.;
(заместитель председателя Совета);
3. Рудская Анжела Григорьевна, доктор физико-математических наук, профессор, 1.3.20;
(ученый секретарь Совета);
4. Авакян Леон Александрович, доктор физико-математических наук, 1.3.8.;
5. Вербенко Илья Александрович, доктор физико-математических наук, 1.3.20.;
6. Власенко Валерий Григорьевич, доктор физико-математических наук, 1.3.20.;
7. Кочур Андрей Григорьевич, доктор физико-математических наук, профессор, 1.3.8.;
8. Кубрин Станислав Петрович, доктор физико-математических наук, 1.3.8.;
9. Лаврентьев Анатолий Александрович, доктор физ.-математических наук, проф., 1.3.8.;
10. Орешко Алексей Павлович, доктор физико-математических наук, доцент, 1.3.20.;
11. Павелко Алексей Александрович, доктор физико-математических наук, 1.3.8.;
12. Резниченко Лариса Андреевна, доктор физико-математических наук, проф., 1.3.8.;
13. Рошаль Сергей Бернардович, доктор физико-математических наук, с. н. с., 1.3.20.;
14. Рыбьянец Андрей Николаевич, доктор физико-математических наук, 1.3.8.;
15. Сидашов Андрей Вячеславович, доктор физико-математических наук, доцент, 1.3.8.;
16. Тополов Виталий Юрьевич, доктор физико-математических наук, профессор, 1.3.8.;

ВСЕГО присутствуют **16** членов совета из 18; причем по профилю диссертации присутствуют **10** докторов наук по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния**.

Кворум имеется.

Председатель: Тер-Оганесян Никита Валерьевич;

Ученый секретарь: Рудская Анжела Григорьевна.

СЛУШАЛИ: 1) *председателя диссертационного совета, доктора физико-математических наук Тер-Оганесяна Никиту Валерьевича,* сообщившего, что диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему **«Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств»** *Ширяевой Анастасии Андреевны* принята к предварительному рассмотрению и выложена на сайт ЮФУ 02.07.2026 в диссертационном совете **ЮФУ801.01.20**. Диссертация и первичные документы соискателя успешно прошли проверку в Управлении аттестации научных кадров ЮФУ.

Ширяева Анастасия Андреевна, 01.02.2000 года рождения, обучается с 2023 по настоящее время в очной аспирантуре по направлению 03.06.01 - Физика и астрономия, по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Справка об обучении и сдаче кандидатских экзаменов №203-1/22 052 выдана 25 мая 2026 года федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Южный федеральный университет».

Диссертация на тему: **«Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств»** выполнена в отделе рентгеновской и электронной спектроскопии Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет». *Научный руководитель – Власенко Валерий Григорьевич*, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник отдела рентгеновской и электронной спектроскопии Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет».

Экспертная комиссия диссертационного совета ЮФУ801.01.20 назначена диссертационным советом Протоколом №01 от 03.07.2026. Состав **экспертной комиссии** диссертационного совета ЮФУ801.01.20 (в дальнейшем Комиссия):

члены Совета: доктор физико-математических наук, профессор **Кочур** Андрей Григорьевич - *председатель*; доктор физико-математических наук **Авакян** Леон Александрович и доктор физико-математических наук, доцент **Сидашов** Андрей Вячеславович - *члены* Комиссии, рассмотрела Диссертацию.

Предоставляю слово председателю Комиссии **Кочур** Андрею Григорьевичу для изложения Заключения Комиссии. Прошу, Андрей Григорьевич.

2) *Председатель экспертной комиссии, профессор Кочур А. Г.:*

Заключение экспертной комиссии о диссертации Ширяевой А. А.

1. Диссертация Ширяевой Анастасии Андреевны представляет собой завершённую научно-квалификационную работу. Цель исследования: установить взаимосвязь между структурой и оптическими свойствами металлокомплексов на основе производных оснований Шиффа β -аминовинилкетонов с ионами меди и цинка, а также экспериментально проверить их функциональную пригодность в качестве активных слоёв органических светодиодов и солнечных элементов, сенсibilизированных красителем. Полученные результаты вносят вклад в решение актуальных проблем физики конденсированного состояния тем, что раскрывают роль стерических и электронных эффектов в формировании супрамолекулярной упаковки молекулярных кристаллов, определяют механизмы электронных переходов, контролирующих оптическую ширину запрещённой зоны, и демонстрируют возможность целенаправленного управления функциональными свойствами материалов путём варьирования молекулярной архитектуры координационных соединений.

Научная новизна полученных результатов обусловлена реализацией комплексного подхода, сочетающего молекулярный дизайн и высокоточные измерения физико-химических характеристик при создании новых материалов на основе оснований Шиффа и их комплексов с цинком(II) для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств. Установлены универсальные корреляции «структура–свойство» и детально проанализированы ключевые физические

процессы, определяющие эффективность устройств: кинетика инжекции электрона и рекомбинационные потери в рассматриваемых солнечных элементах, а также перенос энергии и времена жизни возбуждённых состояний в изучаемых органических светодиодах. Впервые показано, что метилирование аминометиленового фрагмента β -аминовинилкетонов создаёт стерическое напряжение, вызывающее конформационную лабильность: поворот нафтильных или хинолильных заместителей нарушает копланарность, снижает π -сопряжение, увеличивает запрещённую зону и изменяет межмолекулярные взаимодействия в кристалле. Для комплексов Cu(II) выявлена корреляция между заместителем и геометрией узла: хинолильные группы стабилизируют квадратно-пирамидальную координацию, нафтильные - плоско-квадратную. В комплексах Zn(II) с гидроксильными основаниями Шиффа удлинение цепи $-(CH_2)_nOH$ при $n \geq 3$ индуцирует дополнительные π - π -взаимодействия, стабилизирующие упаковку, при этом электронные и фотолюминесцентные свойства от длины заместителя не зависят. На основе лигандов с $n = 4-6$ созданы прототипы органических светодиодов, подтверждающие их перспективность как синих электролюминофоров. Сравнение свойств глауцинсодержащих оснований Шиффа и их хелатов Zn(II) показало, что отсутствие ионов цинка снижает эффективность светодиодов до 5,18 %, что объясняется переключением механизма переноса заряда на межлигандный и потерей планарности.

2. Диссертация соответствует Паспорту специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, по формуле специальности: «Основой специальности является теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твёрдом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях» и по направлениям исследований: п. 1. «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и, в том числе, материалов световодов как в твёрдом (кристаллы, поликристаллы), так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического,

изотопного состава, температуры и давления»; п. 2. «Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств упорядоченных и неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы, дисперсные, и квантовые системы» и п. 6. «Разработка экспериментальных методов изучения физических свойств и создание физических основ промышленной технологии получения материалов с определёнными свойствами».

3. Всего по теме Диссертации представлено 18 публикаций: 1 статья – в рецензируемых научных журналах из Перечня ВАК Минобрнауки РФ, 6 статей – в научных изданиях, входящих в Scopus, Web of Science, RSCI, 3 статьи – в журналах, индексируемых в РИНЦ и 8 тезисов докладов в трудах различных конференций. Все публикации в полной мере отражают содержание диссертации. Публикации основных научных результатов Диссертации соответствуют требованиям к количеству и качеству публикаций, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук. Недостоверных сведений о публикациях соискателя не обнаружено.

4. Проведённая проверка Диссертации с использованием электронной системы контроля оригинальности текстов «Антиплагиат.ВУЗ.ЮФУ» в Управлении аттестации научных кадров ЮФУ показала, что в Диссертации полностью оригинальный текст составляет 76,4 %, цитирования – 0 %, самоцитирования – 1,48 %, совпадения – 22,12 %. Новая проверка Комиссии показала, что по содержанию некоторые «совпадения», относящиеся в основном к списку литературы или к подписям рисунков по тексту диссертации типа «а, б, в, г» могут быть исключены из категории совпадений. После этих и других разрешённых системой «исключений» необходимых шаблонных выражений или принятых наименований физических терминов, якобы заимствованных, оригинальность текста диссертации Ширяевой А. А. увеличилась до 90,32 %, а самоцитирование уменьшилась до 1,22 %, а ИИ-контент - 0%. Таким образом, анализ этих категорий по физическому содержанию текста показал, что по сумме

трёх показателей – оригинальности 90,32, цитирования – 0 % и самоцитирования 1,22 % – можно считать, что оригинальность текста Диссертации составляет 91,54 %, что существенно превышает рекомендованный порог (85 %).

5. Комиссия предлагает утвердить кандидатуры

- официального оппонента – доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния, профессора Лагутина Бориса Михайловича (ФГБОУ ВО «Ростовский государственный университет путей сообщения», профессор кафедры «Физика»). Выбор кандидатуры официального оппонента обоснован тем, что Лагутин Б. М. является известным специалистом в области теоретической физики конденсированного состояния, имеющим многолетний опыт исследований электронной структуры вещества и широкой апробации полученных результатов с использованием современных спектроскопических методов.

- официального оппонента - кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния, доцента Ершова Игоря Владимировича (Донской государственный технический университет, доцент кафедры «Физика»). Выбор официального оппонента обоснован тем, что Ершов И. В. является специалистом в расчётах и моделировании электронных и оптических свойств кристаллических и низкоразмерных структур из первых принципов, а также интерпретации спектров оптического поглощения.

6. Комиссия рекомендует диссертационному совету принять диссертацию Ширяевой Анастасии Андреевны «Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств» к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

ПОСТАНОВИЛИ:

1. Принять диссертацию «**Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств**» **Ширяевой** Анастасии Андреевны к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния**. Есть ли другие мнения? Нет. Голосуем.

Результаты голосования: за - 16, против - нет, воздержавшихся нет.

2. Утвердить список из рассматриваемых кандидатур *официальных оппонентов*, предложенных экспертной комиссией. Есть ли возражения? Есть ли у членов Совета предложения других списков кандидатур официальных оппонентов? Нет. Тогда голосуем по вопросу об утверждении списка предложенных Комиссией кандидатур оппонентов.

Результаты голосования: за – 16, против - нет, воздержавшихся нет.

3. Раздельное голосование за кандидатуру каждого оппонента:

- *официального оппонента Лагутина* Бориса Михайловича, доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния, профессора (Ростовский государственный университет путей сообщения, профессор кафедры "Физика").

Результаты голосования: за - 16, против - нет, воздержавшихся нет.

- *официального оппонента Ершова* Игоря Владимировича, кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния, доцента (Донской государственный технический университет, доцент кафедры «Физика»).

Результаты голосования: за - 16, против - нет, воздержавшихся нет.

4. Назначить дату защиты на **25 сентября 2026** года.

Результаты голосования: за - 16, против - нет, воздержавшихся нет.

5. Назначить время и место защиты:

Защита назначается на **25.09.2026**, в **15.00** часов, в НИИ физики по адресу: Ростов-на-Дону, **просп. Стачки, 194, ауд. 411**.

Результаты голосования: за - 16, против - нет, воздержавшихся нет.

6. Разрешить опубликование автореферата Диссертации на правах рукописи и утвердить список адресов его рассылки.

Результаты голосования: за - 16, против - нет, воздержавшихся нет.

ПОСТАНОВИЛИ: принять диссертацию **Ширяевой** Анастасии Андреевны «Кристаллическая структура и электронное строение молекулярных кристаллов для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств» к защите на **25 сентября 2026** года в **15.00** часов и с разрешением издания и рассылки автореферата диссертации.

Решение принято единогласно.

Председатель диссертационного совета

ЮФУ801.01.20



Тер-Оганесян Никита Валерьевич

Ученый секретарь диссертационного совета

ЮФУ801.01.20

Рудская Анжела Григорьевна