

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).

Диссертация Ширяевой А. А., посвящена развитию одного из активно развивающихся междисциплинарных направлений направлению — установлению связи между строением на различных уровнях (от молекулярного до кристаллического) и функциональными свойствами материалов. Особый интерес представляют металлоорганические гибридные оптические материалы ввиду перспектив создания высокоэффективных устройств генерации и использования электромагнитного излучения в видимой области спектра. В частности, большое внимание исследователей привлекают материалы на основе координационных соединений доступных и дешевых 3d-металлов. В таких соединениях центральный атом определяет жесткость, термическую и электрохимическую устойчивость и ряд функциональных свойств, в то время как варьирование органических лигандов позволяет осуществлять тонкую настройку свойств. В связи с вышесказанным тема исследования является актуальной и востребованной.

Материалы автореферата позволяют сделать вывод, что поставленная цель и задачи были успешно решены соискателем. Научная новизна исследования заключается в реализации комплексного подхода, сочетающего молекулярный дизайн и прецизионные измерения физико-химических характеристик при создании новых материалов на основе оснований Шиффа и их комплексов с цинком для светоизлучающих и фотоэлектрических устройств.

Практическая значимость заключается в создании на основе цинковых комплексов эффективных эмиттеров для электролюминесцентных устройств, излучающих в видимой области спектра, а также сенситизаторов DSSC. За счет удачного подбора лигандов удалось не только изучить новые факторы, определяющие интенсивность фото- и электролюминесценции, но и создать прототипы OLED-устройств с высокими показателями яркости.

Выводы и положения, выносимые автором на защиту, не вызывают сомнения, поскольку основываются на экспериментальных данных, выполненных на высоком уровне. Результаты исследования полностью отражены в статьях высокорейтинговых журналах. Важно отметить, что работа в значительной степени является междисциплинарной и касается не только традиционных разделов физики твердого тела, физической и координационной химии, но тесно пересекается с материаловедением.

По содержанию автореферата можно сделать ряд замечаний:

1. При описании названий комплексов на основе цинка авторы используют число Штока, которое для постоянной степени окисления не используется.

2. На стр. 14 автор приводит значения запрещённой зоны для ряда координационных соединений, однако из текста автореферата непонятно идет ли речь о теоретически рассчитанных значениях или это экспериментальные данные.

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 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 ее 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.

Доктор химических наук (1.4.1
Неорганическая химия),
доцент, заведующий кафедрой
общей химии Института
биохимических технологий,
экологии и фармации
Крымского федерального
университета имени В.И.
Вернадского.

Гусев Алексей Николаевич

28.08.2026

Адрес: 295007 Республика Крым г. Симферополь, просп. Академика
Вернадского 4

Сайт: www.cfuv.ru

Телефон: +79787234813

Электронная почта: galex0330@gmail.com

