ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Романовой Ксении Андреевны
«Квантово-химическое моделирование мезогенных координационных соединений лантаноидов(III) в надмолекулярно-организованных состояниях и полимерных матрицах»,
представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Актуальность темы исследования обусловлена возрастающей потребностью оптоэлектроники, фотоники и нанотехнологий в новых люминесцентных материалах с прогнозируемыми и управляемыми свойствами. Координационные соединения лантаноидов(III) обладают уникальными фотофизическими характеристиками (узкополосная эмиссия, длительное время жизни возбуждённых состояний, возможность сенсибилизации), однако их широкое применение ограничено сложностью направленного дизайна и недостаточной теоретической изученностью взаимосвязей «структура - надмолекулярная организация - свойство». Диссертационная работа К.А. Романовой посвящена решению этой фундаментальной проблемы на основе комплексного квантово-химического моделирования, включая методы DFT, TDDFT, ab initio молекулярной динамики и машинно-обучаемые межатомные потенциалы, что делает тему безусловно актуальной.

Научная новизна и значимость результатов. В работе впервые:

- установлены количественные критерии (анизотропия геометрии l/d, параметры полиэдров Вороного-Дирихле G_3, RCД) для прогнозирования жидкокристаллических свойств мезогенных комплексов Ln(III) и типа мезофазы;
- выявлены основные каналы внутри- и межмолекулярного переноса энергии, определены скорости прямого и обратного переноса, рассчитаны теоретические квантовые выходы люминесценции для широкого ряда моно- и биядерных комплексов;
- предложены подходы к подбору компонентов композиционных материалов (полимеров, квантовых точек CdSe/CdS/ZnS и др.) на основе анализа донорно-акцепторных взаимодействий и перекрывания спектров;
- предсказаны новые мезогенные комплексы Ln(III) с потенциально высокими ЖК и люминесцентными характеристиками.

Практическая значимость подтверждена тем, что результаты используются в учебном процессе КНИТУ и могут служить теоретической базой для сокращения дорогостоящего экспериментального скрининга при создании люминесцентных материалов для светодиодов, дисплеев, сенсоров и солнечных элементов. Достоверность результатов обеспечена согласованием расчётных данных с экспериментальными (РСА, ИК, ЯМР, спектры поглощения, квантовый выход), а также широкой апробацией на международных и всероссийских конференциях и публикациями в

высокорейтинговых журналах (в том числе Dalton Transactions, Journal of Molecular Liquids, Inorganic Chemistry).

Замечания. В автореферате следовало бы более чётко указать, как именно температура фазовых переходов учитывалась при молекулярно-динамическом моделировании (какие ансамбли и временные масштабы использовались), а также привести конкретные численные значения энергий связи для полимерных матриц с комплексами. Однако эти замечания носят уточняющий характер и не снижают общей высокой оценки работы.

Заключение. Диссертационная работа К.А. Романовой соответствует требованиям пункта 9 Положения о присуждении учёных степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842, в ред. от 16.10.2024), а именно: в ней на основании выполненных автором исследований решена научная проблема установления физико-химических закономерностей между молекулярным строением, надмолекулярной организацией и фотофизическими свойствами мезогенных координационных соединений лантаноидов(III) и их композитов, имеющая важное значение для развития физической химии, координационной химии и материаловедения. Автор заслуживает присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Даю согласие на обработку персональных данных.

доктор физико-математических наук (01.04.07 – Физика конденсированного состояния), доцент, заведующий лабораторией фотоники и органической электроники Центра биофотоники Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» ИОФ РАН, г. Москва

«19» 10 2026г Чаусов Денис Николаевич

Адрес: 119991, г. Москва, ул. Вавилова, д.38, Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» ИОФ РАН. Тел +7 (499) 503-87-75, E-mail: office@gpi.ru

Чаусова Д.Н.

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ

СЕКРЕТАРЯ ИОФ РАН

ГЛУШКОВ В.В.

«19» 10 2026 г.

Вход. № 05-9213

«03» 11 2026 г.

подпись