

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Шеховцова Никиты Александровича «Фотоперенос протона и механизмы люминесценции в комплексах цинка(ii) с лигандами на основе пиримидина и имидазола: теоретическое исследование», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия

Водородная связь имеет первостепенное значение в реализации процессов, необходимых для поддержания жизни, и представляет значительный интерес для исследователей, в том числе при разработке новых молекулярных систем различного назначения. К таким системам относятся молекулы с внутримолекулярными водородными связями, в которых происходит внутримолекулярный перенос протона в возбужденном состоянии (ESIPT). Процесс ESIPT включает перенос возбужденного протона от атома-донора к атому-акцептору внутри одной молекулы вдоль координаты внутримолекулярной водородной связи. Этот механизм может приводить к такому важному эффекту, как аномальный стоксов сдвиг флуоресценции (ASS). Молекулы с внутримолекулярными водородными связями представляют значительный интерес для исследователей различных областей науки и техники с точки зрения создания новых люминесцентных материалов для сенсорики, биовизуализации, органических светоизлучающих устройств (OLED) и многого другого. Поэтому тема диссертационной работы является актуальной. Следует подчеркнуть новизну и оригинальность, связанную с предметом исследования – новых “ESIPT-активных комплексов цинка(II)”

В рецензируемой научно-квалификационной работе содержится решение научной задачи установления механизмов фотопереноса протона, поглощения и фотолюминесценции ESIPT-активных комплексов цинка(II) с лигандами на основе 1-гидрокси-1*H*-имидазола и (2-гидроксифенил)пиримидина, а также самих ESIPT-активных лигандов при помощи квантовохимических методов анализа, имеющей значение для развития физической химии.

Для достижения цели диссертационного исследования Шеховцовым Н.А. сформулировано четыре основные задачи, которые им успешно решены благодаря тщательно спланированным экспериментам по теоретическому моделированию процессов происходящих при фотовозбуждении объектов исследования.

Интересным представляется теоретическое обоснование подхода, направленного на дизайн бифункциональных ESIPT-активных люминофоров, “в которых, помимо, ESIPT-активных сайтов, создается дополнительный *N,N*-сайт, обеспечивающий координацию ионов металлов без затрагивания ESIPT-сайта”.

При прочтении автореферата возникли некоторые замечания, которые не являются принципиальными.

Диссертант утверждает: “Несомненным преимуществом изучения именно координационных соединений является то, что эффективность их люминесценции зачастую в несколько раз превосходит таковую для органических соединений”. Это достаточно слабое обоснование преимуществ координационных соединений, поскольку существует достаточно примеров, демонстрирующих обратное, например, 2-(гидроксифенил)бензоксазолы (квантовые выходы флуоресценции 0.8-0.98) и их комплексы (квантовые выходы флуоресценции - 0.1-0.2).

При рассмотрении флуоресценции в твердом состоянии диссертант не обсуждает влияние процессов агрегации на эффективность флуоресценции. В то же время, широко известно влияние агрегации, порой весьма радикальное, на флуоресценцию по механизмам ACQ (тушение вызываемое агрегацией) и AIE (эмиссия, вызванную агрегацией).

Результаты диссертационного исследования хорошо освещены в периодической печати, о чем свидетельствуют публикации в высокорейтинговых международных журналах, неоднократно представлены на профильных конференциях. Считаю, что диссертационная работа «Фотоперенос протона и механизмы люминесценции в комплексах цинка(ii) с лигандами на основе пиримидина и имидазола: теоретическое исследование» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук в соответствии с пунктами 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 в редакции от 25.01.2024 г.), а ее автор, Шеховцов Никита Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидат химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Согласен на обработку персональных данных.

Метелица Анатолий Викторович,
доктор химических наук (02.00.04 – физическая химия),
проректор по научной и исследовательской деятельности
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»,
344006 г. Ростов-на-Дону, ул. Б. Садовая, 105/42
Телефон: (863)2184000, доб. 10103
Электронная почта: avmetelitsa@sfnedu.ru
27.08.2024

Подпись д.х.н. А.В. Метелицы удостоверяю:
Начальник отдела кадров
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»



М.И. Кудряцева