

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Р.Р. Валиева «Ароматичность и ее связь с фотофизикой и электронной спектроскопией макрогетероциклических соединений: порфириноиды и гетеро[8]циркулены», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности

02.00.04 – Физическая химия

В автореферате описываются основные научные работы Р. Р. Валиева, посвященные разработке методов и алгоритмов вычисления фотофизических, магнитных и ароматических свойств молекулярных соединений. Знание фотофизических и photoхимических свойств молекул, которые исследованы в представленной докторской диссертации, необходимо во многих областях физики, химии и биологии. В частности, они используются при разработке OLED-структур при создании стабильных и ярких дисплеев гаджетов; фотосенсилизаторов в задачах фотодинамической терапии, где необходимо создать схему для эффективной генерации окислителей-убийц раковых клеток. Расчет времени жизни молекул в возбужденном электронном состоянии необходим в астрофизике и астрохимии, при прогнозировании эффективности и коэффициента полезного действия лазеров на красителях, эффективности переноса заряда и его разделения с целью повышения КПД солнечных батарей и так далее. Знание индекса ароматичности, конкретных путей делокализации электронной плотности в макрогетероциклических молекулах важно в разработке химически и термически стабильных молекул, а также в оптических и магнитных приложениях.

В диссертации Р. Р. Валиева решаются последовательно задачи связи молекулярной геометрической и электронной структуры со спектроскопическими свойствами молекул. Конкретно найдена количественная связь между индексом ароматичности и энергетическим положением магнитно дипольных электронных переходов в молекулах

порфириоидов и гетеро[8]циркуленах. Разработан метод вычисления из первых принципов констант скоростей электронных переходов. С его использованием получены фундаментальные и практические сведения о влияние заместителей на значения квантовых выходов флуоресценции, индекса ароматичности порфириоидов и гетеро[8]циркуленов. На основе этих данных были созданы органические светодиоды.

Замечаний по содержанию работы и выводам нет. Считаю, что работа Р. Р. Валиева соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, и Р. Р. Валиев заслуживает искомой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Заведующий кафедрой физической и неорганической химии
Института химии и химико-фармацевтических технологий
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Алтайский государственный университет»
(656049, Алтайский край, город Барнаул, проспект Ленина, дом 61;
(3852) 291-291; www.asu.ru; rector@asu.ru)
Доктор физико-математических наук,
профессор

Безносюк Сергей Александрович
5.02.2021

ПОДПИСЬ(И) ЗАВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК УПРАВЛЕНИЯ КАДРОВ

А. Н. Трушников