

Отзыв

Научного руководителя о работе Сызганцевой Марии Алексеевны «Влияние модификации электронной структуры металл-органических каркасов на времена излучательной и безызлучательной электрон-дырочной рекомбинации», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 — физическая химия.

Сызганцева М.А. поступила на химический факультет Московского Государственного университета имени М.В. Ломоносова в 2012 году. В 2015 году, будучи студенткой 3 курса, распределилась на кафедру физической химии в лабораторию Строения и квантовой механики молекул, в рамках дипломной работы занималась исследованиями в области теории колебаний, и в 2018 году с отличием защитила дипломную работу. С 1 октября 2018 года в течение четырёх лет обучалась в очной аспирантуре химического факультета на кафедре физической химии по специальности 02.00.17 — математическая и квантовая химия.

В период с 2018 по 2022 год Сызганцева М.А. подготовила диссертационную работу по теме «Влияние модификации электронной структуры металл-органических каркасов на времена излучательной и безызлучательной электрон-дырочной рекомбинации». Текст автореферата отражает основные этапы проведенной работы, указаны все полученные теоретически и с помощью вычислительного эксперимента, самостоятельно или в соавторстве результаты, а также их подробный анализ.

В рамках этой работы впервые в мире смоделированы процессы электрон-дырочной рекомбинации в металл-органических каркасах и выявлены основные закономерности этого процесса. Для этой цели была выработана теоретическая и вычислительная методология, использованная в дальнейших расчетах. Разработан теоретический подход для целенаправленной модификации электронной структуры металл-органических каркасов и исследована возможность управляемого изменения времен жизни и путей рекомбинации носителей заряда в этих соединениях за счёт изменения химического состава металлических узлов и лигандов. Обнаружен доминирующий вклад безызлучательной рекомбинации в процессы перехода из возбужденного состояния в основное, выявлены основные резонансные колебательные каналы и предложены подходы для их целевого изменения. В том числе, показана роль мягких фононов в процессах

безызлучательной рекомбинации и теоретически предложен подход, основанный на увеличении жесткости кристаллической решетки, для удлинения времени жизни носителей заряда.

Настоящая диссертационная работа представляет собой целостное научное исследование и обладает научной новизной и практической значимостью. Результаты исследований опубликованы в 6 статьях, в том числе в высокорейтинговых международных журналах JACS и Journal of Physical Chemistry Letters. Полученные результаты также были представлены на международных и всероссийских конференциях. Кроме научной деятельности, Мария Алексеевна имеет опыт педагогической работы на кафедре физической химии, полученный в ходе практики в рамках специалитета и в процессе обучения в аспирантуре. Она также участвовала в качестве приглашенного эксперта-теоретика в совместной работе передовых международных коллективов и публикуется в ведущих научных журналах, включая JACS, Advanced Materials и Advanced Energy Materials.

За время нашего знакомства Мария Алексеевна проявила себя как высококвалифицированный, ответственный, творческий, независимый, способный к самостоятельному решению научных задач и синтезу знаний молодой исследователь, предрасположенный к профессорско-преподавательской работе. За достигнутые успехи в процессе выполнения диссертационной работы и обучения в аспирантуре Сызганцевой М.А. дважды была присвоена стипендия МГУ имени М.В. Ломоносова для студентов, аспирантов и молодых ученых (2020 и 2021 г.), а также стипендия Президента РФ для аспирантов (2021-2022 уч. г.).

Как научный руководитель считаю, что представленная диссертационная работа Сызганцевой Марии Алексеевны является законченным исследованием, отвечающим всем требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении учёных степеней в Московском Государственном университете имени М.В. Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель диссертационной работы,
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры физической химии
химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова



Степанов Н. Ф.

10.06.2022

