

## ОТЗЫВ

официального оппонента

доктора физико-математических наук Слюсаревой Евгении Алексеевны на диссертацию Компанеец Вероники Валерьевны «Особенности вибронного взаимодействия, формирующие оптические спектры линейных полиенов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика

Диссертационная работа Компанеец Вероники Валерьевны «Особенности вибронного взаимодействия, формирующие оптические спектры линейных полиенов» посвящена изучению вибронного взаимодействия, формирующего спектр  $\pi$ -сопряженных молекул, имеющих одинаковые наборы структурных элементов, и демонстрации возможности применения фрагментарного подхода к родственным молекулам. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложения. Во Введении дана общая характеристика работы и проведено обоснование актуальности темы, научной и практической значимости работы, сформулированы основные задачи исследований, описана структура диссертации, приведен список печатных работ, опубликованных по теме диссертации. Первая глава носит обзорный характер. Вторая глава содержит краткую характеристику объектов исследования, обоснование условного разделения исследуемых соединений на три гомологичные группы и знакомит с экспериментальными методами и теоретическими подходами анализа спектров. В третьей главе изложены результаты анализа колебательной структуры тонкоструктурных сопряженных спектров флуоресценции и возбуждения флуоресценции первой группы исследуемых соединений (дифенилполиены с числом двойных связей от 1 до 4). В четвертой и пятой главах проведен вибронный анализ полос тонкоструктурных спектров флуоресценции и возбуждения флуоресценции замещенных соединений второй (замещенные дифенилполиены) и третьей (кросс-сопряженные кетоны) групп исследованных соединений. В Заключении формулируются основные результаты диссертационной работы. Следует отметить, что работа хорошо структурирована, в библиографическом списке автора имеются ссылки на оригинальные разделы диссертации, имеются

список сокращений, таблиц, рисунков, приложений, выводы к каждой главе, что значительно облегчает прочтение работы. Работа содержит минимальное количество опечаток.

К основным результатам, характеризующим вклад автора в исследование, можно отнести всестороннее изучение закономерностей формирования колебательной структуры исследованных соединений по механизмам Франка-Кондона и Герцберга-Теллера и выявление корреляционных связей между параметрами вибронной структуры и их строением.

#### **Актуальность темы исследования.**

Актуальность настоящей диссертационной работы определяется возможностью прогнозирования спектральных свойств целого ряда сложных органических молекул (биологически активных сред и фоточувствительных маркеров) на основе электронно-колебательных характеристик модельных соединений.

#### **Новизна исследований и научная значимость полученных результатов**

1. Впервые создана база данных параметров вибронного взаимодействия (фран-кондоновского и герцберг-теллеровского) одиннадцати соединений класса полиенов: кросс-сопряженных кетонов и дифенилполиенов с одинаковыми структурными элементами.

2. Впервые выявлены корреляции между положением вибронных линий и наличием определенных структурных элементов в молекулах исследованных соединений.

3. Впервые показано, что наличием определенных заместителей в  $\pi$ -сопряженной молекуле можно регулировать интенсивность вибронных полос в спектрах флуоресценции и возбуждения флуоресценции.

#### **Степень обоснованности научных положений**

Достоверность полученных результатов определяется методической обоснованностью производимых измерений. Объяснен выбор растворителей и метод, которым были получены спектры флуоресценции и возбуждения флуоресценции исследуемых соединения (метод Шпольского). Показана и описана принципиальная схема установки лабораторного изготовления, на которой измерялись спектры флуоресценции и возбуждения флуоресценции при гелиевой

температуре (раздел 2.2). Описана методика, используемая в работе для получения вибронных параметров, позволяющая определить интегральную интенсивность вибронного перехода, учитывая влияние на форму вибронной полосы одновременно FC- и HT-взаимодействий (раздел 2.3). Научные положения и выводы обоснованы количественной характеристикой соответствующих параметров (вибронные константы, параметры электронно-колебательных взаимодействий).

#### **Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации**

Результаты, представленные в диссертации Компанеец В.В. безусловно должны войти в соответствующие базы данных. Выводы о высокой степени переносимости для ряда  $\pi$ -сопряженных молекул, имеющих одинаковые наборы структурных элементов, и применение фрагментарного подхода могут быть использованы для прогнозирования оптических свойств ряда родственных молекул в задачах химического синтеза и биотехнологий. Подбор заместителей в  $\pi$ -сопряженной молекуле может быть применен для усиления слабо проявленных вибронных полос в спектрах флуоресценции и возбуждения флуоресценции. Опыт обработки экспериментальных спектров может быть использован в дальнейших исследованиях.

**По содержанию диссертации и форме представления результатов имеются следующие замечания:**

1. Достаточно большое число выводов сделано на основании «Диаграмм колебаний параметров...» (таблицы 3.7, 4.7, 4.9, 5.3 и др.):

- «...значения параметров и степень их идентичности связана со структурной идентичностью, длиной полиеновой цепи и симметрией фрагментов фенильных колец на молекулах», Глава 3;

- «Обнаружено, что требуемое количество вибронных параметров, необходимых для количественного воспроизведения спектральных особенностей, составляет не более 20% от числа воспроизводимых спектральных характеристик», автореферат;

- «Полученные параметры хорошо отражают фрагментарную структуру молекул, что позволяет использовать рассмотренный метод для моделирования и расчетов возбужденных состояний сложных  $\pi$ -сопряженных молекул», Введение.

Однако в тексте диссертации и автореферата отсутствует информация о том, на основании какого количественного критерия делается вывод о связи параметров или об ее отсутствии.

2. В тексте диссертации отсутствует информация о выборе длины волны возбуждения при измерении спектров испускания и длины волны регистрации испускания при измерении спектров возбуждения. Зависимость/независимость формы указанных сопряженных спектров от этих длин волн требует дополнительных пояснений.

3. Автором использован ряд неудачных формулировок. «Разработан алгоритм (диаграммы) сравнения вибронных линий, указывающих на ...», Введение. Диаграмма – это графический способ представления взаимосвязей, в то время как алгоритм – это последовательность действий. Термин «колебание» одинаково часто относится к виду как молекулярного движения (напр., «колебание ядер»), так и в смысле «вариабельности» (напр., «колебание параметра»), что затрудняет понимание.

4. Первые два положения сформулированы в виде отчета (вывода) к работе: «выполнен анализ...», «установлены закономерности...», что не совсем соответствует принятой форме для защищаемого положения. Утверждение в виде тезиса более подходит для защищаемого положения, поскольку содержит суть выявленной закономерности и одновременно условие ее выполнимости. Именно в таком виде сформулированы 3, 4, 5 защищаемые положения.

Перечисленные замечания не носят принципиального характера и не снижают общего положительного впечатления от работы.

**Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней.**

Диссертация обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствует о личном вкладе автора диссертации в науку. Основные результаты диссертации полностью отражены в автореферате и восемнадцати публикациях автора, в том числе восьми – в журналах из списка, рекомендованного ВАК РФ.

Изучение материалов диссертации, автореферата и основных публикаций автора позволяет сделать следующее заключение. Диссертация «Особенности вибронного взаимодействия, формирующие оптические спектры линейных полиенов» соответствует специальности 01.04.05 и удовлетворяет требованиям пунктов 9–11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 года, № 842 (ред. от 21.04.2016, № 335). Ее автор, Компанец Вероника Валерьевна, заслуживает присуждения ей степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Профессор базовой кафедры фотоники и лазерных технологий  
Федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Сибирский федеральный университет»,  
доктор физико-математических наук (01.04.05. Оптика),  
доцент

*Слюсарева*

Слюсарева Евгения Алексеевна

660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79,

Тел.: (391)206-21-07,

эл. почта: [ESlyusareva@sfu-kras.ru](mailto:ESlyusareva@sfu-kras.ru)

**13.10.2020**

Подпись Слюсаревой Е. А. заверяю:

Ученый секретарь Ученого совета ФГАОУ ВО СФУ



*Морозова*

Морозова И.И.