

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Климаревой Елены Леонидовны «Синтез и свойства новых 3,4-фенилендиокситиофенов, функционализированных электроноакцепторными группами, а также олигомеров и полимеров на их основе, как материалов для органической электроники», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Диссертационная работа Е.Л. Климаревой посвящена получению новых производных 3,4-(1,2-фенилендиокси)тиофенов (PheDOT) и изучению их электрофизических характеристик. Объектами исследования явились производные PheDOT с электроноакцепторными фрагментами в качестве заместителей, а также в виде π -дефицитного гетероциклического фрагмента при замене бензофрагмента PheDOT на азиновое ядро. В дополнение к синтетической составляющей в работе большое внимание уделено исследованию оптических свойств новых соединений, в том числе изучению влияния структуры функционализированных соединений на электронные и поверхностные свойства электрополимеризованных наноструктурированных полимерных плёнок, полученных на их основе. Диссертационная работа представляет собой обширное междисциплинарное исследование, в основе которого лежит органический синтез поликонденсированных гетероциклических соединений, а само исследование направлено на получение новых материалов с уникальными прикладными свойствами, необходимыми для их использования в органической электронике, что несомненно определяет ее **актуальность**. Диссертантом был разработан однореакторный метод получения целевых структур с применением микроволнового излучения; получена библиотека PheDOT с различными электроноакцепторными заместителями в бензольном кольце, в том числе бензоаннелированные PheDOT, аза-аналоги PheDOT и соединение F4-BnDOT с семичленным циклом в своем составе. Синтетическая часть работы этим не исчерпывается. Диссертантом были синтезированы производные 3,4-фенилендиокситиофена с нафтил- и антраценилметильными заместителями, которые были электрополимеризованы. Были также синтезированы сопряжённые олигомеры на основе 3,4-(1,2-фенилендиокси)тиофена.

Диссертант успешно сочетает экспериментальную работу, включающую сложный органический синтез и физико-химические исследования, с теоретической, используя квантово-химические расчеты для прогнозирования оптимальной структуры целевых соединений и оценки их физических характеристик. Так, было установлено, что функционализация r [PheDOT] в бензольном кольце сильно влияет на энергию граничных орбиталей, но слабо сказывается на ширине запрещенной зоны; продемонстрировано хорошее согласие теоретических значений энергий ВЗМО/НСМО с электрохимическими данными.

Среди результатов, приведенных в автореферате, стоит отметить установление интенсивной фотолюминесценции в растворах синтезированных производных PheDOT; bathochromный сдвиг максимумов поглощения и испускания тримеров F-P-F и F-QxDOT-F при переходе от растворов к полимерным пленкам, сопровождающийся падением квантового выхода фотолюминесценции; исследование поверхностных наноструктур электрополимеризованных пленок.

По тексту автореферата можно сделать следующие замечания: 1) определив в формулировке цели работы стремление к получению соединений «с заданными электронными свойствами», автор не расшифровывает, к какому набору характеристик (и численных значений) нужно стремиться; 2) вызывает недоумение следующая фраза: «По нашему мнению, повышение выходов целевых продуктов можно достигнуть путем оптимизации условий реакции». Почему это не было сделано? (Представленные выходы для некоторых галогенпроизводных составляют лишь 2-9%.)

Диссертационная работа выполнена на хорошем экспериментальном и теоретическом уровне, ее научная значимость, достоверность результатов и обоснованность основных положений и выводов не вызывает сомнений. Результаты диссертационной работы опубликованы в высокорейтинговых научных журналах и были хорошо представлены на российских и международных конференциях. Содержание и уровень исследований соответствуют квалификационным требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Климарева Елена Леонидовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия

Доктор химических наук по специальности
02.00.03 – органическая химия,
в.н.с. лаборатории функциональных материалов
Института органической и физической
химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
Казанского научного центра РАН

Калинин Алексей Александрович



тел. +7 (843) 272-73-43
e-mail: kalinin@iopc.ru

7 июня 2022 г.

Доктор химических наук по специальности
02.00.04 – физическая химия
г.н.с., зав. лабораторией функциональных материалов
Института органической и физической
химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
Казанского научного центра РАН,
Профессор кафедры органической и медицинской
химии Химического института им. А.М. Бутлерова
Казанского федерального университета

Балакина Марина Юрьевна



тел. +7 (843) 272-73-43
e-mail: mbalakinag@yandex.ru

7 июня 2022 г.

