

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Пермского
федерального исследовательского центра
Уральского отделения Российской
академии наук, академик РАН, доктор
технических наук, профессор



А. А. Барях

2022 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

**Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Пермского федерального исследовательского центра
Уральского отделения Российской академии наук**

Диссертация «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук «Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук».

В период подготовки диссертации соискатель Чухланцева Анна Николаевна обучалась в очной аспирантуре (02.10.2017 – 30.09.2021) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук. С марта 2020 года по сентябрь 2021 года в занимала должность инженера в лаборатории синтеза активных реагентов в «Институте технической химии Уральского отделения Российской академии наук» – филиале Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук. С октября 2021 года по настоящее время Чухланцева А. Н. работает в лаборатории синтеза активных реагентов в должности младшего научного сотрудника, а также занимает должность ассистента кафедры органической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Пермского государственного национального исследовательского университета».

В 2017 году Чухланцева Анна Николаевна окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет». Присвоена квалификация Магистр (освоила программу магистратуры по направлению подготовки 04.04.01 – Химия).

Справка об обучении № 117700\6546-93, содержащая данные о сдаче кандидатских экзаменов по следующим дисциплинам: английский язык («отлично», 4 июня 2018 г.), история и философия науки (химические науки) («отлично», 18 июня 2018 г.) и по специальности 02.00.03 – Органическая химия («отлично», 9 сентября 2019 г.), выдана 30 сентября 2021 г. Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Пермским федеральным исследовательским центром Уральского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель – Абашев Георгий Георгиевич, доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории синтеза активных реагентов «Института технической химии Уральское отделение Российской академии наук» – филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Оценка выполненной соискателем работы

Диссертационная работа Чухланцевой А. Н. на тему «Новые халконы и π-сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» представляет собой самостоятельно выполненную автором научно-квалификационную работу, отвечающей требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Наиболее существенные научные результаты, полученные лично соискателем

Личное участие автора в получении результатов заключается в сборе и анализе литературных данных, в выполнении всей экспериментальной части работы, которая состояла в синтезе и очистке синтезированных соединений, в записи спектров поглощения и испускания, в определении коэффициентов молярного поглощения, значений квантового выхода флуоресценции, в расчёте дипольных моментов, в проведении электрохимического окисления полученных соединений, а также в получении тонких плёнок синтезированных

соединений. Автор принимал непосредственное участие в обработке, анализе, интерпретации полученных результатов, а также в написании научных статей.

В диссертации представлены препаративные методы синтеза халконов, содержащих различные электронодонорные фрагменты, их последующая циклизация с целью получения 4,6-диарил(гетарил)замещенных 2-амино-3-цианопиридинов и 3,5-диарил(гетарил)замещенных 2,6-дицианоанилинов. Исследование оптических и электрохимических свойств полученных соединений показало влияние электронодонорных и электроакцепторных заместителей, их взаимного расположения и симметрии синтезированных хромофоров на физико-химические свойства соединений, что позволяет оценить возможность их применения в качестве материалов для органической электроники.

Достоверности полученных результатов

Работа Чухланцевой А. Н. выполнена на высоком научном и экспериментальном уровне с использованием современных методов физико-химического анализа: ИК-, ЯМР- и масс-спектропии, элементного и рентгеноструктурного анализов. Интерпретация полученных результатов проведена на уровне современной теоретической органической химии, научные положения и выводы вполне обоснованы и надежно подтверждены экспериментальным материалом.

Научная новизна полученных результатов

Синтезированы и охарактеризованы современными физико-химическими методами новые халконы, 2,6-дицианоанилины и 2-амино-3-цианопиридины, которые содержат в своем составе перспективные с точки зрения органической электроники фрагменты, такие как тиофен, 3,4-этилендиокситиофен, карбазол, 1-азаиндолизин, *N,N*-дизамещенные анилины и др.

С помощью абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии исследованы оптические свойства синтезированных соединений, на основании которых рассчитаны значения сдвигов Стокса, оптической ширины запрещенной зоны, коэффициентов молярного поглощения, дипольных моментов и квантовых выходов флуоресценции. На основании исследования электрохимического поведения, выполненного с использованием циклической вольтамперометрии рассчитаны энергии граничных орбиталей.

Систематически исследовано влияние строения π -сопряженных хромофоров на их оптические и электрохимические свойства. Выявлены закономерности влияния природы электронодонорных и электроноакцепторных заместителей, находящихся в структуре молекул синтезированных хромофоров, их количества и взаимного расположения и

симметрии молекул в целом на физико-химические свойства соединений. Установлено, что синтезированные π -сопряженные хромофоры являются перспективными соединениями для материалов, применяемых в разных областях органической электроники.

Практическая значимость и ценность результатов

В работе разработаны и применены стратегии синтеза новых π -сопряженных хромофоров, содержащих различные электронодонорные и электроноакцепторные фрагменты, позволяющие получать целевые соединения с использованием простых синтетических методов и легкодоступных исходных соединений. Одновременное введение в структуру халконов дифениламино группы, а также *N*-замещенных карбазольных фрагментов позволило получить соединения, характеризующиеся высоким значением квантового выхода флуоресценции (30–48%). Показано, что высокими значениями квантового выхода флуоресценции обладают халконы, содержащие 4-бис(2-гидроксиэтил)аминофенильный фрагмент (10–44%), проявляющие положительный сольватохромный эффект, а халкон этой серии, имеющий в своем составе 3,4-этилендиокситиофеновый фрагмент, обладает высоким значением дипольного момента, что делает этот хромофор перспективным кандидатом для устройств нелинейной оптики. Установлено, что бисхалконы, содержащие на концах цепи сопряжения *N*-замещенные карбазольные фрагмент характеризуются большим коэффициентом молярного поглощения (25000–64000 л/моль·см). Данный факт свидетельствует о возможности использования таких структур в качестве материалов для солнечных батарей.

Полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах

По материалам диссертационной работы опубликовано 19 научных работ, из них 8 статей, 6 из которых опубликованы в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК РФ, 11 тезисов докладов на конференциях.

Список статей:

1. **Игнашевич, А. Н. (Чухланцева, А. Н.).** Синтез новых халконов, включающих этилендиокситиофеновый фрагмент / А. Н. Игнашевич (А. Н. Чухланцева), Д. Г. Селиванова, А. А. Горбунов, Е. В. Шкляева, Г. Г. Абашев // Бутлеровские сообщения. – 2015. – Т. 42, №4. – С. 71–74.
2. **Игнашевич, А. Н. (Чухланцева, А. Н.).** Новые халконы, содержащие карбазольные и 3,4-этилендиокситиофеновые фрагменты / А. Н. Игнашевич (А. Н. Чухланцева), Д. Г.

- Селиванова, Т. В. Шаврина, О. А. Майорова, Е. В. Шкляева, Г. Г. Абашев // Журнал органической химии. – 2017. – Т. 53, № 7. – С. 1087-1090.
3. **Игнашевич, А.Н. (Чухланцева, А.Н.).** Синтез и оптические свойства новых халконов, содержащих 3,4-этилендиокситиофеновый фрагмент / А.Н. Игнашевич (А.Н. Чухланцева), Т.В. Шаврина, Е.В. Шкляева, Г.Г. Абашев // Журнал органической химии. – 2020. – Т. 56, №11. – С. 1710-1720.
 4. **Игнашевич, А. Н. (Чухланцева, А. Н.).** Новые 3,5-дизамещенные 2,6-дицианоанилины, содержащие 3,4-этилендиокситиофеновые фрагменты: синтез и дальнейшие превращения / А. Н. Игнашевич (А. Н. Чухланцева), О. А. Майорова, Т. В. Шаврина, Е. В. Шкляева, Г. Г. Абашев // Известия высших учебных заведений. Серия: химия и химическая технология. – 2021. – Т. 64, № 2. – С. 19-25.
 5. **Chukhlantseva, A. N.** Synthesis and optical properties of novel chalcones containing 4-bis(2 hydroxyethyl)aminophenyl fragment / A. N. Chukhlantseva, M. V. Dmitriev, O. A. Maiorova, E. V. Shklyeva, G.G. Abashev // Mendeleev Communications. – 2022. – Vol. 32, №2. – P. 268-270.
 6. **Чухланцева, А. Н.** Новые халконы, содержащие 2-хлоримидазо[1,2-а]пиридиновый фрагмент: синтез и физико-химические свойства / А. Н. Чухланцева, Д. А. Ермолов, И. В. Лунегов, И. Г. Мокрушин, Е. В. Шкляева, Г. Г. Абашев // Журнал органической химии. – 2021. – Т. 57, №12. – С. 1717-1726.
 7. Abashev, G. G. Novel carbazole-containing 3,5-dihetaryl-substituted 2,6-dicyanoanilines / G. G. Abashev, **A. N. Ignashevich, (A. N. Chukhlantseva)**, O. A. Mayorova, T. V. Shavrina, E. V. Shklyeva // AIP Conference Proceedings. – 2020. – Vol. 2280. – P. 050002.
 8. **Игнашевич, А. Н. (Чухланцева, А. Н.).** Синтез и использование этилендиокситиофена и его замещенных (обзор) // А. Н. Игнашевич (А. Н. Чухланцева), Е. В. Шкляева, Г. Г. Абашев // Вестник Пермского университета. Серия «Химия». – 2020. – Т. 10, № 3. – С. 300-317.

Соответствие содержания диссертации паспорту специальности3

Диссертация «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» Чухланцевой Анны Николаевны соответствует паспорту научной специальности 1.4.3 Органическая химия, а именно: п.1 – выделение и очистка новых соединений; п. 3 – развитие

рациональных путей синтеза сложных молекул; п. 7 – выявление закономерностей типа «структура – свойство».

Диссертация «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» Чухланцевой Анны Николаевны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3 – Органическая химия, отрасль науки – Химические науки.

Заключение принято на совместном заседании лаборатории синтеза активных реагентов (№3), органических комплексообразующих реагентов (№4), биологически активных соединений (№8) «Института Технической Химии Уральского отделения Российской академии наук» – филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук».

Присутствовало на заседании 21 человек. Принимало участие в голосовании 21 человек.

Результаты голосования: «за» – 21 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 1 от 24 января 2022 г.

Председательствующий
на совместном заседании
лаборатории «ИТХ УрО РАН»

Шкляев Ю. В.,
д-р хим. наук, профессор,
зав. отделом органического синтеза
«ИТХ УрО РАН»

Секретарь
Совместного заседания
Лаборатории «ИТХ УрО РАН»

Перевощикова А. Н.
к.х.н. научный сотрудник
лаборатории синтеза активных реагентов
«ИТХ УрО РАН»