

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.218.02, СОЗДАННОГО НА
БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ УФИМСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО
ЦЕНТРА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК**

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 7 декабря 2022 г. № 95

О присуждении Чухланцевой Анне Николаевне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» в виде рукописи по специальности 1.4.3. Органическая химия принята к защите 3 октября 2022 г. (протокол заседания № 90) диссертационным советом 24.1.218.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450054, г. Уфа, проспект Октября, 71; диссертационный совет создан в соответствии с приказом № 370/нк от 20 декабря 2018 г.).

Соискатель – Чухланцева Анна Николаевна, «19» июля 1993 года рождения. В 2017 году соискатель окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет» (ПГНИУ). В период подготовки диссертации соискатель Чухланцева Анна Николаевна обучалась в очной аспирантуре (02.10.2017 – 30.09.2021) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук. С 1 октября 2021 года по настоящее время Чухланцева Анна Николаевна работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории синтеза активных реагентов филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук «Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук».

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Пермском федеральном исследовательском центре Уральского отделения Российской академии наук, в лаборатории синтеза активных реагентов филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук «Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук».

Научный руководитель – Абашев Георгий Георгиевич доктор химических наук, старший научный сотрудник (02.00.03 – Органическая химия), ведущий научный сотрудник лаборатории синтеза активных реагентов филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального

исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук «Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук».

Официальные оппоненты:

Носова Эмилия Владимировна – доктор химических наук, доцент (02.00.03 – Органическая химия), профессор кафедры органической и биомолекулярной химии Химико-технологического института Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина».

Тухватшин Вадим Салаватович – кандидат химических наук (02.00.03 – Органическая химия), доцент кафедры органической и биоорганической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» (с 1 ноября 2022 года Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»).

дали положительные отзывы на диссертацию.

В отзывах оппонентов указано, что диссертация Чухланцевой Анны Николаевны «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» представляет собой законченное научное исследование, в котором на основании выполненных автором исследований решена важная задача в области органической химии, а именно – разработаны рациональные синтетические подходы к хромофорам, с практически важными для органической электроники оптическими и электрохимическими свойствами. Представленная работа по своей актуальности, научной новизне, значению для науки и практики, объему и уровню соответствует требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (в редакции от 20.03.2021 г.), а её автор Чухланцева Анна Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пермский государственный аграрно-технологический университет имени академика Д.Н. Прянишникова» (ПГАТУ) (г. Пермь) в своем положительном отзыве, подписанном Акентьевой Татьяной Анатольевной, канд. хим. наук, доцентом, заведующей кафедрой общей химии ПГАТУ и Юнниковой Лидией Петровной, д-ром хим. наук, профессором кафедры общей химии ПГАТУ, и утвержденном Андреевым Алексеем Петровичем, канд. ист. наук, и.о. ректора ПГАТУ, указала, что научная новизна работы Чухланцевой Анны Николаевны «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» базируется на разработке новых методов синтеза π -сопряженных хромофоров, содержащих электронодонорные фрагменты. В заключении отмечается, что в диссертации соискателя Чухланцевой Анны Николаевны «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств», соответствует паспорту специальности 1.4.3. Органическая химия и представляет собой научно-квалификационную работу, в которой на основании выполненных автором исследований в области химии

гетероциклических соединений решена актуальная задача органической химии – разработаны методы синтеза сопряженных хромофоров, содержащих электронодонорные (тиофен, 3,4-этилендиокситиофен, N-алкилкарбазолы и др.) фрагменты, различные электроноакцепторные группы, а также изучена взаимосвязь структуры полученных соединений и их фото- и электрофизических свойств. Представленная работа отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям и соответствует критериям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в редакции от 20.03.2021 г.), а ее автор, Чухланцева Анна Николаевна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Соискатель имеет 19 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 6 статей в научных журналах, рекомендованных ВАК, из которых 5 статей включены в базы данных Web of Science и Scopus, а также 2 статьи в сборниках и 11 тезисов докладов на научных конференциях. В публикациях полностью освещены все основные аспекты диссертационной работы: представлены результаты анализа данных, полученных при проведении экспериментальных исследований. Все результаты, представленные на защиту, опубликованы в виде статей в рецензируемых научных журналах. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. 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. Shklyayeva, G. G. Abashev // Mendeleev Communications. – 2022. – Vol. 32, №2. – P. 268-270.
5. 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.

На автореферат диссертации поступило 7 отзывов от:

д-ра хим. наук, профессора кафедры химии и технологии органических соединений азота Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)» Островского Владимира Ароновича; д-ра хим. наук, профессора, заведующего лабораторией полисеразотистых гетероциклов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук Ракитина Олега Алексеевича; д-ра хим. наук, профессора, ведущего научного сотрудника, заместителя заведующего лабораторией азотсодержащих соединений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук Кравченко Ангелины Николаевны; канд. хим. наук, научного сотрудника лаборатории гетероциклических соединений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органического синтеза им. И. Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук Квашнина Юрия Анатольевича; д-ра хим. наук, профессора, заведующего кафедрой органической химии и высокомолекулярных соединений Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина» Сосновских Вячеслава Яковлевича; канд. хим. наук, ведущего научного сотрудника, заведующего лабораторией полимерных солнечных батарей Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института синтетических полимерных материалов им. Н.С. Еникоплова Российской академии наук Лупоносова Юрия Николаевича; д-ра хим. наук, ведущего научного сотрудника лаборатории стереохимии сорбционных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук Хотиной Ирины Анатольевны.

В положительных отзывах имеются следующие вопросы, замечания и пожелания:

1. Автором не приведено достаточно четкое обоснование выбора электронодонорных заместителей (тиофена, 3,4-этилендиокситиофена, *N*-алкилкарбазолов, *N,N*-дизамещенных анилинов, 1-азаиндолизина, и др.).
2. На схемах 2.22 и 2.27 продемонстрированы синтезы целевых хромофоров различными синтетическими путями. Однако, ни на схемах, ни в тексте диссертации не указаны выходы продуктов реакций при использовании того или иного пути синтеза.
3. Как любая большая работа, диссертация Чухланцевой Анны Николаевны не лишена некоторых опечаток и стилистических погрешностей в тексте (стр. 10, 32, 52 и др.).
4. Результаты оценки энергий граничных орбиталей, полученные из данных ЦВА, следовало дополнить данными квантово-химического исследования.
5. В тексте автореферата нет данных о проверке соблюдения закона Бугера-Ламберта-Бера. В тоже время молекулярные структуры некоторых соединений не исключают возможность отклонения от этого закона.
6. Было бы полезно сопоставить данные квантового выхода и других фотофизических параметров с характеристиками известных прототипов и эталонов.

7. К сожалению, из данных автореферата осталось неясным, какие формил-, ацетил-производные гетероциклов и халконы описаны в литературе, а какие синтезированы диссертантом впервые.

8. В автореферате имеются опечатки и не совсем корректные выражения (стр. 4, 5, 13, 14).

9. На стр. 15 автореферата сообщается об интересном наблюдении – о том, что при увеличении количества атомов углерода в N-алкильном заместителе для соединений 79-81 происходит существенное возрастание интенсивности поглощения и молярного коэффициента экстинкции, однако никаких возможных объяснений для данного феномена в работе не приводится.

Во всех отзывах отмечается актуальность, научная новизна, достоверность сделанных выводов, практическая значимость, а также соответствие требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, изложенным в пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а также то, что автор диссертационной работы, Чухланцева Анна Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что доктор химических наук по специальности 02.00.03 – Органическая химия, доцент (02.00.03 – Органическая химия), профессор кафедры органической и биомолекулярной химии Химико-технологического института Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина», старший научный сотрудник лаборатории гетероциклических соединений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук **Носова Эмилия Владимировна**, является ведущим специалистом в области синтеза и исследования оптических свойств сопряженных хромофоров, включающих гетероциклические фрагменты. Кандидат химических наук по специальности 02.00.03 – Органическая химия, доцент кафедры органической и биоорганической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» (с 1 ноября 2022 года Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский университет науки и технологий») **Тухватшин Вадим Салаватович** является специалистом в области органического синтеза, а также в области молекулярного дизайна органических молекул, автором более 80 научных работ, среди которых заметное место занимают работы, связанные с синтезом гетероциклических соединений.

Выбор ведущей организации обоснован тем, что в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Пермский государственный аграрно-технологический университет имени академика Д.Н. Прянишникова» (г. Пермь) на протяжении многих лет проводятся исследования, связанные с синтезом и трансформацией азотсодержащих гетероциклических соединений.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

впервые разработаны методы, направленные на получение новых симметричных и несимметричных халконов, содержащих различные электронодонорные фрагменты, такие как тиофен, 3,4-этилендиокситиофен (EDOT), пиррол, *N*-алкилкарбазолы, 1-азаиндолизин и *N,N*-дизамещенные анилиновые фрагменты;

реализованы практичные синтетические подходы к 4,6-диарил(гетарил)замещенным 2-амино-3-цианопиридинам, 3,5-диарил(гетарил)замещенным 2,6-дицианоанилинам на основе халконов, в том числе, с применением многокомпонентного синтеза из соответствующих альдегидов и кетонов; показано, что выходы целевых продуктов (4,6-диарил(гетарил)замещенных 2-амино-3-цианопиридинов, 3,5-диарил(гетарил)замещенных 2,6-дицианоанилинов) при использовании циклизации халконов являются более высокими, чем при использовании многокомпонентного подхода;

изучены оптические и электрохимические свойства синтезированных соединений, определены их важные для органической электроники физико-химические характеристики: синтезированные в работе π -сопряженные хромофоры обладают низкими значениями ширины запрещенной зоны, интенсивным поглощением в видимой области и высокими значениями коэффициентов молярного поглощения. Отмечено, что «сближенность» 3,4-этилендиокситиофеновых фрагментов в полученных бисхалконах влияет на уменьшение ширины запрещенной зоны соединения, а введение в структуру целевых хромофоров дополнительного тиофенового фрагмента (по реакции Вильсмейера-Хаака-Арнольда) повышает квантовый выход флуоресценции.

Теоретическая значимость исследования заключается в установлении влияния различных электронодонорных фрагментов (тиофена, 3,4-этилендиокситиофена, *N*-алкилкарбазола, *N,N*-дизамещенного анилина, 1-азаиндолизина, и др.) халконов и 2,6-дицианоанилинов на проявляемые ими оптические и электрохимические свойства; показаны перспективы их применения в органической электронике.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны практичные синтетические подходы и синтезированы новые π -сопряженные хромофоры, содержащие различные донорные и акцепторные фрагменты на основе простых химических трансформаций и легкодоступных исходных соединений;

определены важные для органической электроники практической точки зрения оптические и электрохимические свойства синтезированных соединений (значения сдвигов Стокса, оптической ширины запрещенной зоны синтезированных соединений, коэффициенты молярного поглощения и квантовые выходы флуоресценции).

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

результаты **экспериментальных работ** однозначно подтверждены с помощью современных физико-химических методов исследования структур. Строение всех впервые полученных веществ доказано методами ЯМР-спектроскопии, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии, элементного и рентгеноструктурного анализа. Физико-химические характеристики синтезированных хромофоров исследованы с применением адсорбционной и флуоресцентной спектроскопии. Выделение и очистка соединений

осуществлялись методами экстракции, осаждения, колоночной хроматографии и перекристаллизации. **Теоретическая часть работы** выполнена на высоком методическом уровне с применением современных квантово-химических методов моделирования и исследования структур;

идея работы базируется на том, что π -сопряженные хромофоры, содержащие последовательно соединенные электронодонорные и электроноакцепторные фрагменты, обладают полупроводниковыми свойствами;

использованы современные данные научных исследований по теме диссертации, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, в том числе с применением современных систем сбора и обработки информации (электронные базы данных Scopus (Elsevier), Web of Science (Thomson Reuters)).

Личный вклад соискателя состоит в проведении научных экспериментов, обработке и интерпретации экспериментальных данных, в апробации результатов исследования, подготовке основных публикаций по выполненной работе.

В ходе защиты и обсуждения диссертации официальными оппонентами и членами диссертационного совета были высказаны следующие **критические замечания и вопросы**:

1. В литературный обзор включены несколько структур, которые не относятся к халконам (соединения **35, 90** и **256**).
2. Поскольку в реакциях формилирования молярное соотношение ДМФА/субстрат варьируется достаточно широко (от 1 до 51 эквивалента), можно было привести в схемах 2.1, 2.2, 2.4 это соотношение и обсудить взаимосвязь строения и реакционной способности субстрата.
3. В автореферате пропущены номера соединений **69** и **70**.
4. Не все полученные продукты охарактеризованы с помощью ЯМР спектроскопии ^{13}C .
5. Для соединений, структура которых препятствует плотному π - π -стэкингу, было бы полезно изучить люминесценцию в порошке и явление агрегационно-индуцированной эмиссии.
6. Выявлен ряд опечаток: в тексте диссертации на стр. 3, 13, 32, 41, 45, 54, 71, 73, 86, 90, 112, 120, 122, 129, в автореферате в заголовке таблицы 2; в заголовках таблиц 2.3, 2.5, 2.14 и др.
7. Есть ли информация о фотофизических свойствах аналога халконов, в котором арильные либо гетарильные фрагменты соединены не через линкер $\text{CH}=\text{CH}-\text{C}(\text{O})$, а через виниленовый; и каково влияние карбонильного фрагмента (кроме своеобразного блокирования транс-цис-фотоизомеризации относительно двойной углерод-углеродной связи)?
8. Почему в содержании диссертации (стр. 3, 1 строка сверху) название халкона обозначено цифрой **73**, а не в виде полного названия?
9. В описании реакций кросс-сочетания в литературном обзоре (стр. 12 диссертации), достаточно только ссылки на соответствующие источники.
10. В диссертационной работе на стр. 71 описано проведение альдольно-кетоновой конденсации, которое можно было привести в разделе «Экспериментальная часть».
11. Предполагается ли дальнейшее изучение этих соединений? Есть ли перспективы по их дальнейшему использованию?

12. При проведении синтеза в ступке в присутствии щелочи как от нее избавлялись? Продукт реакции получен в комплексе с гидроксидом натрия?
13. В каком состоянии измеряли квантовые выходы? Они выше в растворах или в твердом состоянии?
14. Каким образом контролировали чистоту полученных соединений?
15. Какая часть наиболее интересна в данной работе - синтетическая или исследовательская? Что можно выделить среди ваших лучших достижений?
16. Кто устанавливал физико-химические свойства синтезированных соединений?
17. Как объяснить эффект увеличения коэффициента экстинкции при увеличении длины алкильного заместителя?
18. Люминесцируют ли полученные продукты под действием видимого света?
19. Какова природа возбужденного состояния? Происходит перенос заряда с донора на акцептор?
20. Ваша система D-A-D – для чего нужно два донора? Перенос заряда идет и в системе A-D или D-A? Если в соединении два донора, то они оба участвуют в переносе заряда?
21. Карбонильная группа в Вашей работе не использована, как продолжение акцепторной составляющей с целью создания более мощного акцептора. Не получается или не пробовали?
22. Как идентифицировали структуры и определяли положение цианогрупп и аминогруппы молекулах?
23. Для еноновых систем с большими заместителями должна наблюдаться конформационная подвижность. Обратите внимание на это в дальнейших исследованиях.

Соискатель согласился с замечаниями 1, 3, 6, 8, 9, 23, на остальные ответил и привел собственную аргументацию (вопросы 2, 4, 5, 7, 10-22):

- Альдегиды 3-6, 11 и 12 – это описанные в литературе соединения, для их получения мы использовали известные методики. Формилирование ароматических циклов протекает через образование реагента Вильсмейера-Хаака (хлориминиевой соли), для образования которого часто берут небольшой избыток, примерно 1.3 эквивалента (как, например, для получения 2-хлоримидазо[1,2-а]пиридин-3-карбальдегида 3 (схема 2.1). Скорее всего, более донорные гетероциклы, такие как EDOT, не нуждаются в избытке реагента Вильсмейера-Хаака, поэтому соотношение ДМФА-субстрат составляло 1:1 (схема 2.4). В случае формилирования трифениламина (схема 2.2). использовался более чем пятидесятикратный избыток ДМФА ввиду того, что необходимо было формилировать все три пара-положения трифениламина.

- Реакция образования халконов, реакция Кляйзена-Шмидта, протекала региоселективно, поэтому для идентификации этих соединений достаточно было ПМР-спектров. В случае образования дицианоанилинов, кроме целевых продуктов могли образовываться и побочные, а также полупродукты (аддукты халкона и малонитрилы только по карбонильной группе), поэтому был снят ^{13}C ЯМР-спектр для одного модельного соединения из серии дицианоанилинов.

5. Начато изучение влияния агрегации на оптические свойства полученных соединений. Исследованы оптические свойства халконов 54 и 94 в растворах ацетонитрил/вода и ТГФ/вода в различных соотношениях. Показано, что добавление воды приводит к

устойчивому снижению интенсивности флуоресценции и батохромному смещению максимума эмиссии. Когда содержание воды превысило 60%, максимум эмиссии сместился в коротковолновую область, и интенсивность излучения увеличилась, что, скорее всего, связано с образованием агрегатов и ограничением внутримолекулярного вращения. В целом происходит тушение интенсивности флуоресценции, что может быть вызвано образованием аморфных агрегатов и π - π -стекингом плоского карбазольного кольца, которые, следовательно, ослабляют интенсивность флуоресценции

- Действительно, все синтезированные в процессе работы халконы находятся в транс-конформации, что подтверждается и данными РСА, и спектрами ПМР. При облучении УФ светом (длина волны 365) переход в цис-изомер не происходит, согласно спектрам поглощения, снятым как до воздействия УФ-облучения, так и после. Карбонильная группа служит не только составляющей частью π -линкера, но и выступает в роли акцепторного фрагмента; в литературе такие соединения относят к хромофорам D- π -A-D типа. Из-за акцепторного фрагмента происходит наиболее эффективный внутримолекулярный перенос заряда и батохромное смещение спектров поглощения, что уменьшает ширину запрещенной зоны. При сравнении известного 1,2-ди(тиофен-2-ил)этена с халконом – 1,3-ди(тиофен-2-ил)проп-2-ен-1-оном, оказалось, что при наличии карбонильной группы спектр поглощения существенно смещается в длинноволновую область (примерно на 70 нм): максимум поглощения виниленового соединения равен 260 нм, а для халкона эта величина составила 330 нм. Виниленовые соединения такого типа (Донор- π -Донор) чаще применяются в качестве спейсеров в хромофорах.

- Согласно с замечанием, но хочу пояснить, что в «Теоретической части» описывается выделение побочных продуктов альдольно-кетоновой конденсации, а в «Экспериментальной части» отдельно описан их встречный синтез.

- Планируется получить пленки синтезированных соединений и исследовать их оптические свойства в пленках.

- Реакционная масса выливалась в воду, соответственно, от щелочи избавлялись.

- Квантовые выходы чаще всего измеряли в разбавленных растворах хлороформа (порядка миллионных моль/л), чтобы оптическая плотность в спектре поглощения не превышала 0,05 относительных единиц. Квантовый выход в твердом состоянии не измеряли, это будет сделано в дальнейшем.

- Метод очистки – колоночная хроматография, контроль по ТСХ, ПМР- и ИК-спектроскопии. В некоторых случаях были сняты масс-спектры.

- На мой взгляд, интереснее исследовать свойства. Если выделять какой-то один основной результат, то это выявление влияния электронодонорных фрагментов и их взаимного расположения в молекуле на ее оптические свойства.

- Да, оптические и электрохимические свойства.

- Это объясняется электронодонорностью алкильного заместителя его влиянием на упаковку молекулы и, следовательно, на ее свойства.

- Такого явного свечения, как, например, у флуоресцеина, не наблюдалось ни у одного из соединений в видимом свете.

- Халкон 73 более полярный в возбужденном состоянии; возможно, в возбужденном состоянии происходит внутримолекулярный перенос заряда, что влияет на свечение и на сами свойства.

- Существуют не только D-A системы, но и системы типа D-A-D-A-D. Для одного из полученных нами халконов проведены квантово-химические расчеты и смоделированы электронные плотности при высшей занятой молекулярной орбитали и низшей свободной молекулярной орбитали.
- В данной работе акцепторную часть заменяли на дицианоанилин (т.е. цианогруппу использовали в качестве акцептора), и сравнивали свойства этих соединений. Модифицирование самой карбонильной группы, получение аддуктов по карбонильной группе пока не проводилось.
- Применяли ИК-спектроскопию (идентификация CN-группы), измеряли массу, для одного из соединений был выполнен рентгеноструктурный анализ.

Диссертационная работа Чухланцевой Анны Николаевны «Новые халконы и π -сопряженные карбо- и гетероциклы на их основе: синтез и исследование фотофизических и электрохимических свойств» полностью соответствует критериям, содержащимся в пунктах 9-11, 13-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 (в редакции от 20.03.2021 г.).

На заседании 7 декабря 2022 г. диссертационный совет принял решение:

за решение задачи в области органической химии, а именно – за разработку эффективных подходов к синтезу новых π -сопряженных хромофоров с ценными для органической электроники оптическими и электрохимическими свойствами, присудить Чухланцевой Анне Николаевне ученую степень кандидата химических наук по научной специальности 1.4.3. Органическая химия (Химические науки).

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 7 докторов наук по профилю защищаемой научной специальности (1.4.3. Органическая химия) участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 18, против – нет, воздержавшихся – нет.



Зам. председателя диссертационного совета

24.1.218.02, д-р хим. наук, доцент


/ Парфенова Людмила Вячеславовна


Председатель диссертационного совета

24.1.218.02, д-р хим. наук, профессор



/ Хурсан Сергей Леонидович

Ученый секретарь диссертационного совета

24.1.218.02, канд. хим. наук


/ Цыпышева Инна Петровна

7 декабря 2022 г.