

Отзыв на автореферат диссертации
Сониной Алины Александровны
«Кристаллическая структура и оптоэлектронные свойства
тиофен- и фуран-фениленов»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертационная работа Алины Александровны посвящена исследованию взаимосвязи кристаллической структуры и оптоэлектронных свойств тиофен- и фуран-фениленов, которые благодаря своим выдающимся люминесцентным и полупроводниковым свойствам имеют большой потенциал применения в органической электронике в качестве светоизлучающих и полупроводниковых материалов. Контроль оптоэлектронных свойств является главной задачей для органической электроники, чего можно добиться, в том числе через контроль кристаллической структуры и систематическое исследование фундаментальной взаимосвязи «структура-свойства». Соискатель исследовала влияние длины цепи сопряжения фуран-фениленовых со-олигомеров, введения терминальных заместителей и воздействия внешних факторов (растворителей, нагревания, механического воздействия) на люминесцентные и полупроводниковые свойства монокристаллов тиофен- и фуран-фениленов. В ходе выполнения работы диссертантом получены кристаллы и определены кристаллические структуры ряда новых тиофен- и фуран-фениленов: 4 фуран-фениленовых со-олигомера с разной длиной цепи сопряжения **FP-4**, **FP-5**, **FP-6**, **FP-7**, 2 фуран-фениленовых со-олигомера с метильными заместителями в пара- и мета-положениях терминальных фенилов **2Me-FP5** и **4Me-FP5**, 3 полиморфных модификации фуран-фениленового со-олигомера с трифторметильными заместителями в пара-положениях терминальных фенилов **CF₃-FP5** и 2 полиморфные модификации тиофен-фениленового со-олигомера с флуорен-илиденовыми заместителями **BFMPТ**. Автор систематически изучила изменение кристаллической упаковки и оптоэлектронных свойств в зависимости от введения заместителей, способа кристаллизации, термического и в некоторых случаях механического воздействия. Исходя из полученных данных автор сделала вывод, что ключевым фактором, определяющим оптоэлектронные свойства линейных π -сопряженных фуран-фениленовых со-олигомеров является наклон длинной оси молекулы относительно базальной грани кристаллов и сдвиг молекул относительно друг друга; тиофен-фениленовый со-олигомер **BFMPТ** обладает агрегационно-индуцируемой люминесценцией благодаря конформационной подвижности флуорен-илиденовых фрагментов.

Эти исследования привели автора к важному результату, определяющему практическую важность работы – к выявлению влияния кристаллической структуры тиофен- и фуран-фениленов на оптические и полупроводниковые свойства полученных соединений.

Проведенная работа, безусловно, демонстрирует высокий уровень квалификации диссертанта, но, к сожалению, это не позволило избежать некоторых мелких ошибок, в том числе, стилистических: на странице 3 в первом абзаце слишком часто встречается слово «эффективный»; на странице 8 в структуре **FP7** отсутствует атом кислорода.

Предложение «Кроме того, благодаря высокоупорядоченной и низкодефектной структуре монокристаллов, значения подвижности заряда и квантового выхода фотолюминесценции являются наиболее высокими по сравнению с таковыми для поликристаллов, пленок и наночастиц, и хорошо коррелируют с кристаллической структурой, т.к. роль дефектов и примесей минимальна» содержит в себе некоторую неточность, так как наличие дефектов в монокристаллах зависят также от чистоты и стабильности веществ, применяемых для выращивания. И, в некоторых случаях, наличие незначительного количества примесей может существенно влиять на свойства материала без нарушения высокоупорядоченности структуры.

На наш взгляд, утверждение «Все кристаллические структуры внесены в Кембриджскую базу структурных данных и находятся в общем доступе.» вряд ли стоит отнести к разделу «практическая значимость».

При обсуждении результатов исследований не хватает обобщенных рекомендаций по структуре веществ, поэтому хотелось бы задать несколько вопросов: стоит ли вводить метильные заместители в структуру соединений (что почти вдвое увеличивает квантовый выход **4Me-FP5** в монокристаллах в сравнении с **FP5**, но уменьшает мобильность заряда)? Есть ли общий тренд между методом и условиями выращивания и эффективностью конечного материала?

Несмотря на эти замечания, автореферат диссертации производит благоприятное впечатление. Полученные результаты представляют интерес для специалистов, работающих в области органической электроники, а также рентгеноструктурного анализа. По теме диссертации опубликовано 4 статьи в рецензируемых международных журналах высокого уровня и были представлены на Российских и международных конференциях.

Объем и уровень представленной Сониной А.А. работы полностью соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней ВАК. На основании

вышеизложенного Сониной Алина Александровна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Согласен на обработку персональных данных.

Кандидат химических наук, доцент,
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»
634050, г. Томск,
Проспект Ленина, 30;
Тел. +7 (3822) 60-63-33
E-mail: postnikov@tpu.ru
22.01.2020

Постников Павел Сергеевич

Подпись Постникова П.С. заверяю
Ученый секретарь
Томского политехнического университета

Ананьева О.А.

Кандидат химических наук, ассистент,
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»
634050, г. Томск,
Проспект Ленина, 30;
Тел. +7 (3822) 60-63-33
E-mail: petuninpavel@tpu.ru
22.01.2020

Петунин Павел Васильевич

Подпись Петунина П.В. заверяю
Ученый секретарь
Томского политехнического университета



Ананьева О.А.