

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.051.01 НА БАЗЕ
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института неорганической химии имени А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук, МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ПО ДИССЕРТАЦИИ **Сониной Алины Александровны**
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

дело № _____

решение диссертационного совета от 19 февраля 2020 года № 4
О присуждении *Сониной Алине Александровне*, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация *«Кристаллическая структура и оптоэлектронные свойства тиюфен- и фуран-фениленов»* в виде рукописи по специальности 02.00.04 – физическая химия (химические науки) принята к защите *11 декабря 2019 г., протокол № 22* диссертационным советом Д 003.051.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии имени А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), (630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012 № 105/нк).

Соискатель *Сонина Алина Александровна*, 1993 года рождения, в 2015 году окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (НГУ) по специальности – химия. С 2015 года по июль 2019 г. соискатель являлась аспирантом НГУ. На данный момент соискатель работает в должности младшего научного сотрудника в лаборатории органической электроники ФГБУН Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН (НИОХ СО РАН).

Диссертация выполнена в группе рентгеноструктурного анализа и в лаборатории органической электроники НИОХ СО РАН.

Научный руководитель – кандидат химических наук *Казанцев Максим Сергеевич* работает в НИОХ СО РАН в должности заведующего лабораторией органической электроники.

Официальные оппоненты:

– *Борисов Станислав Васильевич*, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории кристаллохимии ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск;

– *Гадиров Руслан Магомедтахирович*, гражданин Российской Федерации, кандидат химических наук, доцент, заместитель заведующего лабораторией фотоники и органической электроники ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет», г. Томск дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, ФГБУН Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа, в своем **положительном заключении**, утверждённом и.о. директора, д.х.н., профессором РАН Владимиром Анатольевичем Дьяконовым и подписанном д.х.н., профессором, заведующим лабораторией структурной химии Халиловым Леонардом Мухибовичем, указала, что «...Диссертационная работа А.А. Сониной представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, решающую задачи получения новых знаний о кристаллической структуре и оптоэлектронных свойствах тиофен- и фуран-фениленов. Работа по своей актуальности, научному уровню, объёму выполненных исследований, новизне результатов и их значимости для фундаментальной науки и практики отвечает требованиям пп. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842 (с изменениями от 21 апреля 2016 г. №355), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор, Алина Александровна Сониная, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Отзыв обсужден и одобрен на семинаре Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, протокол №1 от 27.01.2020».

По теме диссертации соискатель имеет 4 опубликованных работы в зарубежных рецензируемых журналах. Все журналы входят в перечень журналов, индексируемых в международной информационно-аналитической системе научного цитирования Web of Science. Общий объём опубликованных работ составляет 33 стр. (2,07 печ. л.), 7 работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Kazantsev, M.S., Sonina, A.A., Koskin, I.P., Sherin, P.S., Rybalova, T.V., Benassi, E., Mostovich, E.A. Stimuli responsive aggregation-induced emission of bis(4-((9H-fluoren-9-ylidene)methyl)phenyl)thiophene single crystals // Mater. Chem. Front. – 2019. – V. 3, No. 8. – P. 1545-1554.

2. Sonina, A.A., Koskin, I.P., Sherin, P.S., Rybalova, T.V., Shundrina, I.K., Mostovich, E.A. and Kazantsev, M.S. Crystal packing control of a trifluoromethyl-substituted furan-phenylene co-oligomer // Acta Cryst. B. – 2018. – V. 74., No. 5. – P. 450-457.

3. Kazantsev, M.S., Beloborodova, A.A., Frantseva, E.S., Rybalova, T.V., Konstantinov, V.G., Shundrina, I.K., Paraschuk, D.Y., Mostovich, E.A. Methyl substituent effect on structure, luminescence and semiconducting properties of furan/phenylene co-oligomer single crystals // CrystEngComm. – 2017. – V. 19, No. 13. – P. 1809-1815.

На диссертацию и автореферат диссертации поступило 6 отзывов. Все отзывы положительные и содержат незначительные замечания. Отзывы поступили от: *академика РАН, д.х.н., профессора Ананикова Валентина Павловича*, заведующего отделом структурных исследований, и *к.х.н., доцента Миняева Михаила Евгеньевича*, старшего научного сотрудника лаборатории направленной функционализации органических молекулярных систем (ФГБУН Институт органической

химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва); *к.х.н. Агиной Елены Валериевны*, заместителя директора по науке ФГБУН Института синтетических полимерных материалов имени Н.С. Ениколопова РАН, г. Москва; *д.х.н., доцента Барташевич Екатерины Владимировны*, профессора кафедры Теоретической и прикладной химии, и *к.х.н. Юшиной Ирины Дмитриевны*, научного сотрудника лаборатории Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов (ФГАОУ ВО "Южно-Уральский государственный университет", г. Челябинск); *д.х.н., профессора Черкасовой Татьяны Григорьевны*, директора Института химических и нефтегазовых технологий ФГБОУ ВО «Кузбасского государственного технического университета» имени Т.Ф. Горбачева, г. Кемерово; *к.х.н., доцента Постникова Павла Сергеевича* и *к.х.н., ассистента Петунина Павла Васильевича* (ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск); *к.х.н. Воложжаниной Анны Владимировны*, старшего научного сотрудника лаборатории рентгеноструктурных исследований (ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, г. Москва).

Большинство замечаний к автореферату носят уточняющий характер. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа А.А. Сониной **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК РФ предъявляет к кандидатским диссертациям, а ее автор А.А. Сониная заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью в области рентгеноструктурного анализа и органической электроники, что подтверждается наличием публикаций оппонентов и сотрудников ведущей организации в данных областях исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– *впервые получены* монокристаллы и *определены* 11 кристаллических структур восьми новых производных тиофен- и фуран-фениленов: 5,5'-дифенил-2,2'-бифурана (**FP4**), 1,4-бис(5-фенилфуран-2-ил)бензола (**FP5**), 4,4'-бис(5-фенилфуран-2-ил)-1,1'-бифенила (**FP6**), 2,5-бис(4-(5-фенилфуран-2-ил)фенил)фурана (**FP7**), двух со-олигомеров с метильными заместителями в *пара*- и *мета*-положениях терминальных фенилов **FP5** (**2Me-FP5**, **4Me-FP5**), трех полиморфных модификаций **FP5** с трифторметильными заместителями в *пара*-положениях терминальных фенилов (**CF₃-FP5**) и двух полиморфных модификаций бис(4-((9H-флуорен-9-илиден)метил)фенил)тиофена (**BFMPТ**);

– *показано*, что варьирование длины цепи сопряжения фуран-фениленовых со-олигомеров не приводит к изменению кристаллической упаковки молекул, а число ароматических фрагментов в молекуле не влияет на квантовый выход фотолюминесценции и подвижность носителей заряда;

– *показано*, что введение метильных заместителей в *пара*- и *мета*-положения терминальных фенильных циклов **FP5** приводит к наклону длинной оси молекул

относительно базальной грани кристаллов, что способствует увеличению термической стабильности при снижении растворимости и подвижности заряда;

- *показано*, что две полиморфные модификации **CF₃-FP5** при нагревании претерпевают необратимый фазовый переход в третью модификацию, сочетающую в себе фрагменты упаковок двух других форм;
- *показано*, что наличие конформационно подвижных фрагментов в **BFMP** приводит к кристаллизации двух полиморфных модификаций, отличающихся, как конформацией молекул, так и их упаковкой. Кроме того, кристаллы полиморфных модификаций имеют различный цвет в видимом свете и при УФ-облучении и морфологию. Отмечено, что для кристаллов данного соединения квантовый выход фотолюминесценции выше, чем для растворов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- *получена* новая информация о способах получения кристаллов тиофен- и фуран-фениленов, их строения и оптоэлектронных свойствах, которая может быть применима для контроля кристаллической упаковки и свойств π -сопряженных молекулярных систем – перспективных материалов для светоизлучающих транзисторов и люминофоров, чувствительных к внешним воздействиям;
- *показано*, что введение трифторметильных заместителей в *пара*-положения терминальных фенильных циклов **FP5** увеличивает растворимость соединения в органических растворителях и приводит к образованию нескольких полиморфных модификаций, отличающихся сдвигом молекул относительно друг друга и углом наклона длинной оси молекулы относительно базальной грани (100) кристаллов;
- на примере производных **FP5** *установлено*, что увеличение сдвига молекул относительно друг друга вдоль их длинных осей способствует повышению квантового выхода фотолюминесценции.

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

- данные о методах получения монокристаллов, кристаллической структуре и оптоэлектронных свойствах тиофен- и фуран-фениленов могут быть использованы для контроля кристаллической упаковки и свойств других линейных π -сопряженных молекул и вносят существенный вклад в основы создания органических материалов для оптоэлектроники;
- кристаллические структуры исследуемых тиофен- и фуран-фениленов внесены в Кембриджскую базу структурных данных и являются общедоступными;
- незамещенные фуран-фениленовые со-олигомеры с разной длиной цепи сопряжения могут рассматриваться в качестве материалов для светоизлучающих транзисторов, поскольку имеют наибольшую подвижность носителей заряда среди исследуемых соединений;
- *бис*(4-((9*H*-флуорен-9-илиден)метил)фенил)тиофен с конформационно-подвижными фрагментами может использоваться для получения материалов, чувствительных к воздействию внешних факторов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

Достоверность результатов обеспечивается согласованностью экспериментальных данных, полученных с использованием комплекса современных физико-химических методов исследования (монокристаллическая и высокотемпературная порошковая рентгеновская дифракция, дифференциально сканирующая калориметрия, метод интегрирующей сферы), а также согласованностью экспериментальных результатов с данными других исследований. Корректность полученных результатов подтверждается их воспроизводимостью. Признание результатов работы мировым научным сообществом подтверждается наличием публикаций по результатам выполненной работы в престижных рецензируемых международных журналах.

Личный вклад автора заключался в анализе и обобщении литературных данных по теме диссертации, получении монокристаллов, проведении монокристаллических и высокотемпературных порошковых рентгенодифракционных экспериментов, анализе и обработке данных с использованием программы Crystal Explorer17. Соискатель принимал участие в исследовании оптических и полупроводниковых свойств кристаллов. Подготовка результатов исследований к публикации статей и тезисов докладов проводилась автором совместно с научным руководителем и соавторами работ.

Диссертационный совет Д 003.051.01. на заседании 19 февраля 2020 г., протокол № 4 пришел к выводу о том, что диссертация соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», т.е. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой разработан подход к модификации тиофен- и фуран-фениленов с целью контроля кристаллической структуры и оптоэлектронных свойств монокристаллов и изучено влияние кристаллической упаковки на термическую стабильность и оптоэлектронные свойства исследуемых соединений, что важно для разработки новых материалов для органической электроники; принято решение присудить Сониной Алине Александровне ученую степень кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 27 (двадцати семи) человек, из них 14 (четырнадцать) докторов наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, участвовавших в заседании и голосовании, из 33 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 27 (двадцать семь), против присуждения ученой степени – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Председатель
чл.-к. РАН, д.с.н.

В.П. Федин

Ученый секретарь
д.ф.-м.н.

В.А. Надолинный

19 февраля 2020

Федин В.П. Надолинный В.А.
Филатов В.В.
секретарь ИНХ СО РАН
02 2020 г.