

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чулановой Елены Александровны «Комплексы с переносом заряда и анион-радикалы на основе халькоген-азотных пи-гетероциклов: квантово-химический дизайн, синтез, пространственная и электронная структура», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

В последнее время большой интерес ученых привлекают халькоген-азотные пи-гетероциклы. Такого рода соединения могут иметь самые разнообразные направления использования, в частности, как флюорофоры и электроноакцепторные билдинг-блоки с узкой запрещенной зоной для солнечных батарей и органических полевых транзисторов. Поэтому дизайн и синтез новых 1,2,3-бензодитиазолов и 2,1,3-бензохалькогенадиазолов, исследование электронной структуры этих соединений с помощью квантово-механических расчетов является важной и актуальной задачей, представляющей как научный, так и практический интерес.

Для решения этой задачи Чулановой Е. А. рассчитаны сродства к электрону ряда 1,2,3-бензодитиазолов и 2,1,3-бензохалькогенадиазолов, исследовано их электрохимическое и химическое восстановление до анион-радикалов и возможность образования комплексов с переносом заряда 2,1,3-бензохалькогенадиазолов. В результате работы впервые синтезированы стабильные гомо- и гетероспиновые соли анион-радикалов (6*H*-1,2,3-бензодитиазол-6-илиден)малононитрила установлено, что эти соединения в твердом теле образуют диамагнитные димеры. Выделены и охарактеризованы анион-радикалы 2,1,3-бензоселенадиазола и 2,1,3-бензотеллурадиазола. Впервые синтезирована серия комплексов с переносом заряда, в которых оба компонента являются производными 1,2,5-халькогенадиазолов; структура этих комплексов исследована с помощью электронных спектров поглощения и методов DFT расчетов и QTAIM анализа, которые показали их слабосвязанность и величину переноса заряда менее 0.03e. Открыта новая химическая реакция – C-N кросс-сочетание с межмолекулярной миграцией атома водорода при взаимодействии 4-амино-2,1,3-бензоселенадиазола с бис(1,2,5-тиадиазоло)пиразином, для которой предложен четырехстадийный механизм реакции; обнаружена необычная пористая структура кристаллов продукта реакции.

В заключение хотелось бы отметить, что соискателем проделана сложная и кропотливая работа. Выводы обоснованы и отражают полученные в ходе выполнения работы результаты. Достоверность полученных результатов сомнений не вызывает. По

результатам диссертации опубликовано 6 статей в международных и российских рецензируемых журналах и 7 тезисов докладов на научных конференциях.

Диссертационная работа Чулановой Елены Александровны по актуальности выбранной темы, объему проведенных исследований, значимости полученных результатов в теоретическом и прикладном аспектах соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заведующий лабораторией полисераазотистых гетероциклов
Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
д.х.н., профессор



Ракитин Олег Алексеевич

ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук
Ленинский проспект 47, Москва, 119991
тел. (499) 1355327 e-mail: orakitin@ioc.ac.ru

Подпись зав. лаб. № 31, д. х. н. проф. О. А. Ракитина заверяю:

Ученый секретарь ИОХ РАН

к.х.н.



И. К. Коршевец

05.10.2019