Отзыв
на автореферат диссертации Коскина Игоря Павловича

“Теоретическое изучение фуран-фениленовых со-олигомеров как перспективных материалов для органической электроники”,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия».

Теоретическое исследование методами расчетов из первых принципов структурных и электронных свойств π - сопряженных малых молекул является актуальной темой современной физической химии, а также других смежных областей знания, таких как электроника, материаловедение, физика конденсированного состояния, химия высокомолекулярных соединений. Это обусловлено тем, что данный класс соединений находит широкие перспективы применения в разработке макетов органических светоизлучающих диодов (OLED), органических полевых транзисторов (OFET) и других устройств органической электроники. Выбранный автором объект исследования - фуран-фениленовый со-олигомер 1,4-бис(5-фенилфуран-2-ил)бензол (FP5) и серия модифицированных молекул на его основе - обладает хорошей растворимостью и в форме тонкопленочных материалов обладает полупроводниковыми свойствами, демонстрирует достаточно высокие значения квантового выхода фотолюминесценции. Главный результат работы, состоящий построении моделей фуран- и тиофен-фениленовых со-олигомеров, установлении оптических и полупроводниковых свойств модельных соединений и материалов и в установлении взаимосвязи этих свойств со структурой исследованных соединений, является решением важной фундаментальной проблемы физической химии.

В работе получен целый ряд оригинальных результатов, которые, безусловно, могут рассматриваться как новые. Среди них отмечу следующие. Впервые установлено, что торсионная жесткость фуран-фениленовых со-олигомеров связана с большей степенью сопряжения через фурановый фрагмент за счет его меньшей ароматичности. На примере 1,4-бис(5-фенилфуран-2-ил)бензола и 1,4-бис(5-фенилтиофен-2-ил)бензола продемонстрировано, что увеличение торсионных барьеров при замене тиофенового фрагмента на фурановый происходит за счет увеличения эффективности π-сопряжения. Впервые показано, что избирательное введение атомов фтора в фуран-фенилены в пара- или мета-положения фенилов приводит к увеличению торсионной жесткости. Введение атомов фтора в орто-положения фенильных фрагментов приводит к снижению торсионной жесткости и потере планарности по причине электростатического отталкивания атомов фтора и кислорода. Впервые показано, что потенциал ионизации, статическая

поляризуемость, энергии поглощения и излучения увеличиваются при аннелировании фуран- и тиофен-фениленовых со-олигомеров.

Содержание и выводы автореферата диссертации Коскина Игоря Павловича свидетельствуют о высокой научной подготовке диссертанта. Диссертационная работа Коскина Игоря Павловича, полностью соответствует требованиям п.9-14 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 "О порядке присуждения ученых степеней" (ред. от 11.09.21), а ее автор, Коскин Игорь Павлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - физическая химия.

Профессор кафедры электроники твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета, доктор физико-математических наук (шифр специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния)

15 мая 2023 г. Комолов Алексей Сергеевич

Я, Комолов Алексей Сергеевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Коскина Игоря Павловича, и их дальнейшую обработку.

15 мая 2023 г. Комолов Алексей Сергеевич

Контактные данные:
Адрес: 199034, г. Санкт-Петербург, СПбГУ, кафедра электроники твердого тела, Университетская наб. д.7/9
Телефон: +7 (812) 428 45 38
email: a.komolov@spbu.ru

Личную подпись Комолова Алексея Сергеевича удостоверяю

И.о. начальника отдела кадров № 3 И.И. Константинова

15.05.2023