

УТВЕРЖДАЮ:

директор Федерального
государственного бюджетного
учреждения науки Новосибирского
института органической химии им.
Н.Н. Ворожцова Сибирского
отделения Российской академии
наук
д.ф.-м.н., профессор



Е.Г. Багрянская

«15» июня 2018 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук от «15» июня 2018 года

Диссертация Дян Ок Тона «Использование реакции Дильса-Альдера 1,1-дифторнафталин-2(1*H*)-онов для синтеза функционально замещенных полициклических арен» выполнена в Группе изучения механизмов органических реакций НИОХ СО РАН.

В период подготовки диссертации соискатель Дян О.Т. работал в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук в Лаборатории изучения механизмов органических реакций лаборантом с 2011 г. и младшим научным сотрудником с 2015 г. В 2014 году окончил Новосибирский государственный университет по специальности «химия», с сентября 2014 по настоящее время обучается в очной аспирантуре НИОХ СО РАН (приказ о зачислении №398-к от 01.09.2014).

Удостоверения о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2018 г. ФГБУН НИОХ СО РАН.

Научный руководитель – д.х.н., проф. Бородкин Геннадий Иванович.

Тема диссертационной работы Дяна О.Т. утверждена на заседании Учёного совета НИОХ СО РАН (протокол № 14 от 25.11.2014).

Отзыв рецензента к.х.н. Генаева А.М. на диссертационную работу – положительный.

Полициклические ароматические соединения (ПАС) линейного и углового строения, представляют большой интерес в качестве полупроводниковых материалов для органических полевых транзисторов, светодиодов и солнечных батарей. Фторзамещенные ПАС являются перспективным классом соединений для органической полупроводниковой электроники благодаря уникальным свойствам атома фтора, таким как высокая электроотрицательность, относительно малый размер, а также способность к участию в нековалентных взаимодействиях с другими атомами. Одним из стратегических подходов к синтезу фторзамещенных ПАС является их сборка из фторированных фрагментов.

Реакция [4+2]-циклоприсоединения (реакция Дильса-Альдера) является мощным синтетическим методом создания шестичленных циклических систем в одну стадию и представляет несомненный интерес в синтезе ПАС. Однако недостаток разнообразия фторированных «строительных блоков» ограничивает синтетический потенциал реакции Дильса-Альдера в синтезе фторированных ПАС. В этой связи поиск и изучение доступных фторированных диенофилов для реакции Дильса-Альдера является крайне актуальной задачей

Научная новизна. В результате проведенной работы впервые была исследована реакция Дильса-Альдера 1,1-дифторнафталин-2(1*H*)-онов – бензаннелированных циклогекса-2,4-диенонов, несущих в своем составе двойную связь в *Z*-конфигурации, сопряженную с ароматической π -системой. Исследовано влияние среды на конверсию диенофила и диастереоселективность циклоприсоединения на примере 22 растворителей. Получены линейные корреляции логарифма соотношения *эндо*-/*экзо*- аддуктов с эмпирическими параметрами полярности растворителя Ω и E_T^N . Показана возможность получения производных фенантрена путем ароматизации первичных аддуктов циклоприсоединения 1,1-дифторнафталин-2(1*H*)-онов к цикlopентадиену, 1,3-циклогексадиену и 2,3-диметил-1,3-бутадиену. С помощью квантово-химических расчетов методом DFT показано, что обратимость циклоприсоединения 1,1-дифторнафталин-2(1*H*)-она к цикlopентадиену связана с относительно низкой величиной свободной энергии активации $\Delta G^\ddagger$ и относительно высокой свободной энергией реакции $\Delta_r G$ по сравнению с 1,3-циклогексадиеном и 2,3-диметил-1,3-бутадиеном. В рамках модели искажение-взаимодействие установлено, что основной вклад в энергетический барьер вносит изменение геометрии диена в ходе реакции. Выявлено, что энергия искажения геометрии 1,1-дифторнафталин-2(1*H*)-она слабо меняется в реакции с простыми алкадиенами и существенно возрастает в случае фурана и антрацена. Впервые был осуществлен синтез набора 5,5-дифтортетрафен-6(5*H*)-онов по реакции Дильса-Альдера замещенных 1,1-

результатов. В публикациях 2 и 3 вклад соискателя является основным и состоит в постановке проблемы, планировании исследований, проведении синтеза, анализе, интерпретации и обсуждении результатов.

Во время выполнения диссертационной работы Дян О.Т. проявил себя самостоятельным и квалифицированным исследователем, являлся исполнителем гранта РФФИ (№ 16-33-00944), руководителем гранта УМНИК (№ 5619ГУ1/2014, 10774ГУ2/2016), с 2018 г. является руководителем гранта РФФИ мол_а (№ 18-33-00529). В период обучения в аспирантуре НИОХ СО РАН Дян О.Т. занимался педагогической работой, проводил практические занятия по курсу "органическая химия" у студентов 2-ого курса ФЕН НГУ и активно участвовал в 14 российских и международных конференциях.

Диссертация «Использование реакции Дильса-Альдера 1,1-дифторнафталин-2(1H)-онов для синтеза функционально замещенных полициклических арен» Дян Ок Тона рекомендуется к защите на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.03. – органическая химия.

Присутствовало на заседании 18 чел, в том числе 8 кандидатов наук и 9 докторов наук. Результаты голосования: "за" – 18 чел., "против" – 0 чел., "воздержалось" – 0 чел., протокол № 12 от 15.06.2018 года

Председатель семинара
зам. директора НИОХ СО РАН
к.х.н.

Суслов Е.В.

Секретарь семинара
к.х.н.

Оськина И.А.