

Отзыв на автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук Радюш Екатерины Алексеевны на тему «Высокоакцепторные производные 1,2,5-халькогенадиазолов, их анион-радикалы, супрамолекулярные комплексы и комплексы с переносом заряда: дизайн, синтез, исследование структуры и свойств»

Диссертационная работа Радюш Е.А. посвящена развитию химии 1,2,5-халькогенадиазолов, представляющих интерес в связи с их высоким сродством к электрону, делающим их перспективными материалами для органической электроники.

Автором диссертации с использованием квантово-химических методов сначала были предсказаны электронные свойства ряда соединений, а затем производные с наиболее выраженными акцепторными свойствами были синтезированы, и изучены их кристаллические структуры, электрохимические свойства и способность образовывать комплексы с переносом заряда или анион-радикальные соли.

Автореферат написан хорошим научным языком, ясно демонстрирует значительный вклад автора диссертации в развитие химии указанного класса гетероциклических соединений.

По содержанию автореферата имеются **замечания**:

1. На С. 7 автореферата указано, что выбор целевых соединений осуществлялся на основе квантово-химических DFT расчетов с использованием модели (U)B3LYP/6-31G(d) для расчета сродства к электрону. Представляется, что для термодинамических расчетов указанные функционал и особенно базис малого размера не являются оптимальными. В автореферате отсутствует информация, насколько хорошо предсказанные значения сродства к электрону согласовывались с экспериментальными данными и проводилось ли сравнение различных вычислительных подходов, включающих другие базисы и функционалы.

2. На Схеме 1 показано бромирование 2,1,3-бензотиадиазола N-бромсукцинимидом до тетрабромпроизводного и указывается, что метод впервые был предложен автором. Возможно, так оно и было, но опубликована эта методика была другими исследователями в 2021 году (выход 70 %, 10.1039/D1TC03536C), а с участием автора диссертации – в 2023 году (выход 61 %, 10.1002/cphc.202200876).

Указанные замечания не ставят под сомнение достоверность полученных результатов и сделанных выводов. Диссертация отвечает требованиям пп. 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 в действующей редакции), а ее автор, Радюш Екатерина Алексеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия.

доктор химических наук, доцент
ведущий научный сотрудник лаборатории
металл-органических координационных полимеров
ФГБУН «Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева» Сибирского отделения
Российской академии наук



Потапов Андрей Сергеевич

630090 г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 3
Тел. +7-383-316-58-45, e-mail: potapov@niic.nsc.ru

4.10.2023

Подпись А.С. Потапова заверяю
Ученый секретарь ИНХ СО РАН, д.х.н.



О.А. Герасько