

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации ПАВЛОВА Александра Александровича на тему: «Спектроскопия ЯМР парамагнитных комплексов 3d-переходных металлов», представленной на соискание учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) является ключевым инструментом в исследовании структуры и свойств химических соединений. Однако её применение к парамагнитным системам, особенно комплексам 3d-переходных металлов, долгое время оставалось ограниченным из-за сложностей интерпретации данных. Работа Павлова Александра Александровича как раз и посвящена преодолению этих ограничений посредством разработки новых методологических подходов, что делает её исключительно актуальной для современной физической химии и смежных областей.

Актуальность исследования обусловлена необходимостью создания универсальных методов анализа данных ЯМР парамагнитных соединений, перспективных для использования в таких областях, как спинтроника, медицинская диагностика, структурная биология, катализ и другие прикладных направлений. Автор успешно решает эту проблему, предлагая инновационный метод приведённых парамагнитных сдвигов (ППС).

Научная новизна и значимость работы заключаются в следующем:

1. Разработан метод ППС, основанный на температурной зависимости химических сдвигов. Этот подход позволяет независимо от традиционных методов решать задачи отнесения сигналов, разделения контактного и дипольного вкладов, а также определения магнитной анизотропии.
2. Впервые установлены спиновые состояния комплексов железа(II), железа(III) и кобальта(II) с использованием парамагнитной ЯМР-спектроскопии, включая анализ спиновых переходов.
3. Показана необходимость комплексного применения магнитометрии, ЯМР и ЭПР для достоверного определения параметров магнитных взаимодействий.
4. Выявлены комплексы с рекордной магнитной анизотропией (например, комплекс 36), перспективные для использования в качестве парамагнитных меток и сенсоров.
5. Доказана возможность анализа структурных изменений комплексов в растворе, что критически важно для понимания их реакционной способности.

Однако имеются некоторые **вопросы и замечания по работе**:

1. Регистрация спектров ЯМР в широком температурном диапазоне может оказаться достаточно трудоёмким экспериментом. Возможно ли применение метода приведённых парамагнитных сдвигов (ППС) в случае ограниченности температурных данных?

2. Говоря о мономолекулярных магнитах, известно, что комплексы лантанидов являются более перспективным классом магнетиков, чем комплексы 3d-металлов. Будет ли метод ППС эффективен для комплексов лантанидов?

3. Подписи на некоторых рисунках слишком мелкие и трудноразличимые.

4. В нескольких местах наблюдается путаница в обозначениях, например, на рисунке 28 аксиальная анизотропия тензора магнитной восприимчивости обозначена " $\Delta\chi_{ax}$ ", а в большинстве других мест — " $\Delta\chi_{акс}$ ".

Тем не менее, казанные замечания **не влияют** на общее положительное впечатление от автореферата, не умаляют научной значимости и достоверности результатов и выводов работы, а носят лишь рекомендательный характер.

Таким образом, работа Павлова Александра Александровича «Спектроскопия ЯМР парамагнитных комплексов 3d-переходных металлов», **полностью соответствует** требованиям «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года в действующей редакции. Автор диссертации Павлов Александр Александрович **заслуживает** присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 - физическая химия.

Ведущий научный сотрудник лаборатории карбоциклических соединений (№ 10) Института органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН (ИОХ РАН),
доктор химических наук

 С.В. Баранин
03.06.2025

Почтовый адрес: 119991 Россия, Москва, Ленинский проспект, д.47

Телефон: тел.: 7(499)1358951, Адрес электронной почты: svbar@ioc.ac.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН)

Подпись д.х.н. С.В. Баранина заверяю.

Учёный секретарь ИОХ РАН
кандидат химических наук





И.К. Коршевец