

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Павлова А.А. представляет собой всестороннее и фундаментальное исследование в области парамагнитной ЯМР-спектроскопии комплексов 3d-переходных металлов. Работа отличается высокой степенью научной новизны, теоретической глубиной и прикладной значимостью.

Актуальность работы обусловлена необходимостью развития методов спектроскопии ЯМР для изучения парамагнитных соединений — класса веществ, имеющего большое значение для таких перспективных областей, как спинтроника, молекулярная электроника, медицинская диагностика, сенсорики и структурная биология. Несмотря на значительный прогресс в области ЯМР парамагнитных соединений, парамагнитная спектроскопия по-прежнему остается малодоступной из-за сложности интерпретации сигналов. Работа Александра Александровича направлена на преодоление этих ограничений.

Научная новизна диссертации заключается в разработке метода приведенных парамагнитных сдвигов (ППС), позволяющего количественно и качественно анализировать температурные зависимости химических сдвигов, разложение этих сдвигов на контактные и дипольные компоненты, а также определение магнитных характеристик без привлечения дополнительных методов. Автором предложен оригинальный способ интерпретации данных ЯМР в совокупности с квантово-химическими расчетами, данными ЭПР и магнитометрии, что позволило повысить точность и достоверность получаемой информации.

Практическая значимость работы состоит в возможности применения разработанных подходов для определения структуры, спинового состояния и магнитных параметров перспективных соединений. Особое внимание заслуживает успешное применение метода ППС для определения спиновых состояний в растворе и выявления структурных изменений комплекса по сравнению с твердым состоянием, что имеет важнейшее значение для катализаторов и МРТ-меток.

В качестве достоинств работы следует отметить: комплексность подхода, сочетающего ЯМР, ЭПР, магнитометрию и DFT-моделирование; строгую верификацию предложенного метода на широком ряде соединений; высокий уровень экспериментальной проработки; убедительное описание физических основ наблюдаемых эффектов; значительное число публикаций по теме (36 работ, включая высокорейтинговые журналы); ясность изложения и логичность структуры исследования.

В качестве замечаний следует отметить, что некоторые положения могли бы быть усилены сопоставлением с альтернативными методами анализа магнитных взаимодействий, а также обсуждением ограничений применимости разработанного подхода к системам с более сложной электронной структурой. Замечания носят частный, не принципиальный характер, и не снижают научной ценности представленного труда.

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

доктор химических наук

заведующий научно-технологическим
центром «Платиновый центр ИОНХ РАН»

ФГБУН Институт общей и неорганической
химии им. Н.С. Курнакова РАН

Вашурин Артур Сергеевич



28.05.2025

119991, г. Москва, Ленинский проспект, 31

+7(495)775-65-85 (доб.1-12)

vashurin@igic.ras.ru

