

Отзыв на автореферат диссертационной работы
Павлова Александра Александровича
СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР ПАРАМАГНИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ 3d-
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ, представленной на соискание ученой степени
доктора химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Изучение молекулярных магнитов и соединений со спиновым переходом требует применения разнообразных физико-химических и теоретических методов анализа, поскольку их поведение определяется сложным взаимодействием структурных, электронных и супрамолекулярных факторов. Среди таких методов наиболее доступной является спектроскопия ЯМР, ее применение к парамагнитным соединениям затруднено из-за сложностей с интерпретацией спектров. Ресурсы для ЭПР и магнитометрии остаются сравнительно ограниченными, а измерения ЭПР в терагерцовом диапазоне относятся к уникальным исследованиям на установках класса MegaScience. Квантово-химические методы требуют значительных вычислительных мощностей и чувствительны к уровню расчётов.

В связи с этим, диссертационное исследование Александра Александровича Павлова направлено на развитие подходов, связанных с использованием спектроскопии ЯМР, для получения надёжной информации об электронном строении и свойствах мономолекулярных магнитов и соединений со спиновым переходом. В частности, автор разработал новый метод интерпретации спектров парамагнитных комплексов, для которых неприменимы стандартные представления об электронных эффектах заместителей. Объектами исследования стали парамагнитные комплексы железа и кобальта с N-гетероциклическими лигандами, для которых уже накоплен значительный объём экспериментальных данных, в том числе, полученных другими методами изучения магнитных свойств.

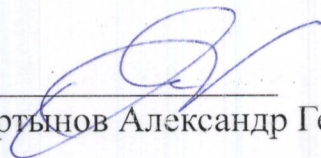
Проведённое исследование продемонстрировало, как спектроскопия ЯМР может стать источником ценной информации об электронной структуре соединений, превращаясь из рутинного метода в мощный инструмент анализа. При прочтении автореферата не обнаружено принципиальных возражений, затрагивающих научную составляющую настоящей работы. Вместе с тем, хотелось бы задать ряд уточняющих вопросов и сформулировать замечания;

• Было бы интересно рассмотреть возможность применения метода приведённых сдвигов к комплексам лантанидов, для которых существует метод разложения на контактную и псевдоконтактную составляющие, основанный на

формализме Блини. Этот вопрос может рассматриваться как пожелание для дальнейшего развития предложенного метода.

Таким образом, диссертационная работа Павлова А.А. соответствует критериям, предъявляемым к диссертациям по п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 в действующей редакции, поскольку в ней решена научная задача создания подходов к использованию спектроскопии ЯМР для анализа структуры и свойств молекулярных магнетиков и соединений, проявляющих спиновый переход. Автор работы заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Член-корреспондент РАН,
доктор химических наук, профессор РАН,
ведущий научный сотрудник лаборатории
новых физико-химических проблем
Федерального государственного
бюджетного Учреждения науки Институт
физической химии и электрохимии им.
А.Н. Фрумкина РАН,


Мартынов Александр Германович

3 июня 2025 г.

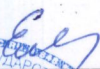
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии
наук (ИФХЭ РАН)

Адрес: 119071, Москва, Ленинский проспект 31, корп. 4

Телефон: +7 (903) 174-26-45

E-mail: martynov.alexandre@gmail.com

Подпись Мартынова А.Г. заверяю
Заведующая канцелярией ИФХЭ РАН


Емельянова Наталья Александровна

