

Отзыв

на автореферат диссертации Алешина Дмитрия Юрьевича
«Спектроскопия ЯМР для анализа электронной структуры и магнитных свойств комплексов кобальта и железа с N-гетероциклическими лигандами», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Совершенствование методологии анализа данных спектроскопии ЯМР критически важно для исследования спинового перехода в моноядерных и полиядерных комплексах, являющихся основой перспективных квантовых компьютеров. Помимо этого, усовершенствование способов анализа химических сдвигов в комплексах катионов *d*-металлов перспективно для определения термодинамических параметров спинового перехода и электронной структуры мономолекулярных магнитов на основе доступных данных о химических сдвигах в спектрах ЯМР и, как следствие, для построения корреляций «структура-свойство» и поиска новых магнитных материалов.

Наиболее важным результатом работы можно считать новый подход к численному моделированию зависимости химического сдвига в спектрах ЯМР при различных температурах, который позволяет однозначным образом определять термодинамические параметры спинового перехода в растворах соответствующих комплексов железа(II). Помимо этого применение модели Гриффита-Фиггиса позволило детально описать электронную структуру новых мономолекулярных магнитов с ионом кобальта(II) в тригонально-призматическом и искаженном координационных окружениях. Также предложен новый метод разделения контактного и псевдоконтактного вкладов в парамагнитный химический сдвиг, который позволяет разделить данные вклады без квантово-химических расчетов.

Автореферат оформлен должным образом с ясным и конкретным изложением основного содержания работы. Имеется только одно замечание. В подписи к рисунку 17 указано «химическим сдвигам, рассчитанным методом VZLYP». Очевидно, под «VZLYP» понимается один из распространённых гибридных обменных функционалов, используемых в теории функционала электронной плотности. Для однозначного указания «метода», этого явно недостаточно.

Основные научные положения, представленные в автореферате, полностью обоснованы, выводы аргументированы. Выполненная работа и оформленная диссертация полностью соответствуют критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным

Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года в действующей редакции, и Алешин Дмитрий Юрьевич заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия.

Я, Александров Евгений Викторович, даю согласие на использование и обработку моих персональных данных на нужды, связанные с работой диссертационного совета 24.1.161.01.

Доцент кафедры "Общая и неорганическая химия" ФГБОУ ВО «СамГТУ», кандидат химических наук (02.00.01 – неорганическая химия)
Тел: +7 917 812-63-87
e-mail: aleksandrov_ev1@mail.ru

Александров
Евгений
Викторович



Александров Е. В. заверяю



К. В. Савельев
Проректор по подготовительной
деятельности

Полное название организации: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Самарский государственный технический университет» (ФГБОУ ВО «СамГТУ»).

Почтовый адрес: 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244,
Главный корпус, <https://samgtu.ru/>

Телефон: (846) 278-43-11

Факс: (846) 278-44-00

Электронная почта: rector@samgtu.ru, upd@samgtu.ru

Дата составления: 06.06.2023 г.