

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.

Использование спектроскопии ядерного магнитного резонанса для изучения строения и свойств таких классов соединений, как мономолекулярные магнетики и соединения проявляющие свойства спинового перехода в данное время является актуальной и практически значимой проблемой, поскольку такие соединения рассматриваются как кандидаты для создания различных молекулярных переключателей, химических сенсоров, сред для сверхплотного хранения информации, а также элементной базы для квантовых компьютеров. Бурное развитие спектроскопии ЯМР в данном направлении, а также рост числа публикаций за последнее время показывает неподдельный интерес научного сообщества к данной теме и подтверждает актуальность диссертационного исследования.

Диссертационная работа Алешина Дмитрия посвящена созданию новых и модификации существующих подходов использования спектроскопии ЯМР для определения термодинамических параметров спинового перехода и изучения электронной структуры мономолекулярных магнитов по температурным зависимостям химического сдвига. Предложенный подход к численному моделированию позволяет достаточно легко и однозначно получать термодинамические параметры данного перехода, что особенно важно при установлении корреляций между структурой соединений и их свойствами. Продемонстрированной эффект обменного уширения в полиядерных комплексах, а также демонстрация применения метода ЯМР для описания двухступенчатого спинового равновесия, открывает новые возможности для описания спинового перехода в полиядерных комплексах. В

частности, использование модели Гриффита-Фиггиса при описании барьеров перемагничивания в комплексах кобальта(II) показало, что спектроскопия ЯМР может успешно применяться для установления параметров магнитной анизотропии комплексов, проявляющих свойства мономолекулярных магнетиков. В то же время предложенный метод приведенных парамагнитных сдвигов, который позволяет разделять контактную и псевдоконтактную части в парамагнитном химическом сдвиге, имеет более широкое применение и может использоваться как в структурных исследованиях белков, так и при определении магнитных свойств соединений. Таким образом, диссертационная работа вносит существенный вклад в развитие физической и координационной химии.

Автореферат написан хорошим языком, хорошо иллюстрирован и полностью отражает смысл диссертационного исследования, однако при его прочтении возникли следующие замечания

1. На рисунке 12 не приведено значение магнитного поля, в котором измеряли магнитную восприимчивость комплексов кобальта(II).
2. На рисунке 17 не подписаны единицы измерения аксиальной анизотропии магнитной восприимчивости, хотя в подписи к рисунку они приведены.

Перечисленные замечания не имеют принципиальный характер и никак не влияют на научную значимость работы. Полученные результаты и выводы достоверны и не вызывают вопросов, что также подтверждается большим количеством опубликованных работ в ведущих мировых высокорейтинговых журналах. Выполненная работа 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, Щербаков Игорь Николаевич, даю согласие на использование и обработку моих персональных данных на нужды, связанные с работой диссертационного совета 24.1.161.01.

Заведующий кафедрой
физической и колloidной химии
имени профессора В. А. Когана,
доктор химических наук
(02.00.04 – физическая химия)

Телефон: +7(863) 218-40-00 доб.
11404

e-mail: shcherbakov@sfedu.ru



Щербаков Игорь
Николаевич

Подпись И. Н. Щербакова заверяю,
Декан химического факультета



Е. А. Распопова

Полное название организации: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет» (ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»).

Почтовый адрес: 344006 г. Ростов-на-Дону, ул. Б. Садовая, 105/42,

<https://sfedu.ru/>

Телефон: +7(863) 218-40-00, +7(863)263-31-58, +7(863)263-84-98

Факс: +7(863)-263-87-23

Электронная почта: info@sfedu.ru

Дата составления: 13.06.2023 г.