

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИНЭОС РАН

Член-корр. РАН, д.х.н. А.А. Трифонов

« 10 »



2021 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской академии наук (ИНЭОС РАН)

Диссертационная работа «Направленный дизайн комплексов переходных металлов со спиновым переходом на основе бис(пиразолил)пиридинов» **выполнена** Никовским Игорем Алексеевичем в лаборатории №209 «Центр исследования строения молекул» ИНЭОС РАН. В период подготовки и выполнения работы Никовский И.А. обучался в очной аспирантуре (2018-2021 гг.) ИНЭОС РАН и работал в указанной лаборатории в должности инженера-исследователя (2018-2019 гг.), затем – младшего научного сотрудника (2019 г. – н.в.).

Никовский И. А. окончил в 2018 году Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология», получив квалификацию «Магистр».

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2021 г. ИНЭОС РАН.

Научные руководители: Полежаев Александр Владимирович, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории № 302 гетероцепных полимеров ИНЭОС РАН. Новиков Валентин Владимирович, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории №202 ядерного магнитного резонанса ИНЭОС РАН.

Диссертационная работа была представлена на объединённом научном коллоквиуме лаборатории №209 «Центр исследования строения молекул» и лаборатории №202 ядерного магнитного резонанса при участии трех членов диссертационного совета ИНЭОС РАН.

В ходе обсуждения диссертанту были заданы следующие вопросы:

–н.с., к.х.н. Алиев Т.М.: Насколько полученные пентакоординационные комплексы железа устойчивы в атмосфере воздуха?

–г.н.с., д.х.н. Перегудов А.С.: Оказывает ли влияние индуктивный эффект заместителей в орто-положении на спиновый переход?

–в.н.с., д.х.н. Нелюбина Ю.В.: С чем связано отсутствие спинового перехода в том случае, когда в качестве орто-заместителей выступают атомы брома?

По итогам заседания коллоквиума принято следующее заключение:

Диссертационная работа Никовского И. А. имеет важное теоритическое и практическое значение в области координационной химии, направлена на установление корреляций структура-свойство, в качестве которого выступает спиновый переход в комплексных соединениях железа(II) и кобальта(II), для их дальнейшего применения в качестве молекулярных материалов для устройств молекулярной электроники. В частности, проведенное исследование позволяет сформулировать общие рекомендации по выбору функциональных групп, которые необходимо ввести в бис(пиразол-3-ил)пиридин или солигандов для управления параметрами температурно-индуцированного спинового перехода.

Предложен новый дизайн бис(пиразол-3-ил)пиридинов который обеспечивает протекание температурно-индуцированного спинового перехода в соответствующих комплексах. Предложенный дизайн может быть перенесен на комплексы других лигандов на основе пиридина для индуцирования спинового перехода.

Впервые удалось получить серию комплексов железа(II) с N-замещенными бис(пиразол-3-ил)пиридинами, которые претерпевают температурно-индуцированный спиновый переход. Показана возможность

управления температурой спинового перехода за счёт электромерных и стерических эффектов. Выработаны рекомендации по подбору таких заместителей.

Отработаны методы синтеза гетеролептических комплексов железа(II) и кобальта(II) с бис(пиразол-3-ил)пиридиновыми лигандами. Показана возможность управления параметрами спинового перехода за счёт подбора солиганда в гетеролептических комплексах железа(II) и кобальта(II). При помощи разработанных подходов впервые синтезирован комплекс кобальта(II) с 2,6-бис(пиразол-3-ил)пиридинами, способный к спиновому переходу.

Работа выполнена на высоком профессиональном уровне. Интерпретация данных не вызывает каких-либо противоречий. Выводы по работе являются четко сформулированными и обоснованными, а их достоверность не подлежит сомнениям.

Личный вклад автора состоит в непосредственном участии во всех этапах диссертационного исследования: от постановки задачи и выполнения синтетической работы до анализа полученных данных и подготовки публикаций.

Научная новизна и практическая значимость. В рамках данной работы проведен систематический анализ различных аспектов структуры в ряду комплексов железа(II) и кобальта(II) с бис(пиразол-3-ил)пиридиновыми лигандами, и установлены их взаимосвязи с параметрами температурно-индуцированного спинового перехода, в первую очередь, в растворе. Проведенное исследование позволило сформулировать общие рекомендации по выбору функциональных групп в бис(пиразол-3-ил)пиридиновых лигандах и солигандов для направленного дизайна моноядерных комплексов переходных металлов с заданными параметрами температурно-индуцированного спинового перехода. Решение указанной проблемы внесет важный вклад в одно из приоритетных направлений развития науки – создание новых типов функциональных материалов для техники и технологий, в

первую очередь – для использования в качестве материалов для молекулярной электроники: наноразмерных сенсоров, переключателей, логических устройств и устройств для хранения информации.

Основное содержание работы отражено в 8 публикациях в рецензируемых научных журналах и 3 тезисах докладов.

Диссертация «Направленный дизайн комплексов переходных металлов со спиновым переходом на основе бис(пиразолил)пиридинов» Никовского И. А. полностью соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года №842 и приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 10 ноября 2017 года №1093, предъявляемых к диссертационным работам на соискание **ученой степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.8 – «Химия элементоорганических соединений» и 1.4.4 – «Физическая химия»**. Заключение принято на объединённом заседании научного коллоквиума лаборатории №209 «Центр исследования строения молекул» и лаборатории №202 ядерного магнитного резонанса ИНЭОС РАН при участии трех членов диссертационного совета «10» июня 2021 года.

На заседании присутствовало 13 человек: д.х.н. Перегудов А.С. (член совета), д.х.н. Новиков В.В., д.х.н., Волошин Я.З. (член совета), д.х.н. Нелюбина Ю.В., д.х.н. Логинов Д.А. (член совета), к.х.н. Полежаев А.В., к.х.н. Павлов А.А., к.х.н. Годовиков И.А., к.х.н. Алиев Т.М., м.н.с. Денисов Г.Л., к.х.н. Хакина Е.А., ст. лаб. Алешин Д.Ю., инж-иссл. Еськова М.А.

Результаты голосования: «за» - 13 человек, «против» - 0 человек, «воздержалось» - 0 человек.

Председатель коллоквиума _____ Ю.В. д.х.н. Нелюбина Ю.В.

Секретарь коллоквиума _____ Т.М. к.х.н. Алиев Т.М.

*Логинов д.х.н. Нелюбина Ю.В. и к.х.н. Алиева Т.М.
заверяю.
Удостоверен секретарь
ИНЭОС РАН, к.х.н.
[Подпись] / Булаков Е.И.*