

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Благова Максима Андреевича  
«Комплексы Fe(III) на основе гекса- ( $N_4O_2$ ) и тридентатных (ONS) лигандов,  
обладающие термически индуцированным спиновым переходом»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»

Работа Благова М.А. посвящена исследованию спинового кроссовера и созданию комплексов и материалов с ценными прикладными свойствами, гибридных систем на основе координационных соединений железа.

В диссертационной работе Благова М.А. синтезированы, определены и исследованы кристаллические структуры и магнитные свойства солей на основе спин-переменных комплексов Fe(III) с координационным узлом  $N_4O_2$  и  $N_2S_2O_2$ :  $[Fe(3-OMe-Sal_2trien)]NO_3 \cdot H_2O$ ,  $[Fe(3-OMe-Sal_2trien)][Fe(tdas)_2] \cdot CH_3CN$ ,  $K[Fe(5Cl-thsa)_2]$  и  $Li[Fe(thpy)_2] \cdot 3H_2O$ . Установлены корреляции между спиновым состоянием Fe(III) с координационным фрагментом  $N_4O_2$ , конформацией лиганда и длинами связей Fe(III) – лиганд. Продемонстрировано совпадение между долей высокоспиновой фракции  $\gamma_{BC}$  и соотношением высоко- и низкоспиновых конформеров катиона  $[Fe(3-OMe-Sal_2trien)]^+$  в соли  $[Fe(3-OMe-Sal_2trien)][Fe(tdas)_2] \cdot CH_3CN$ . Обнаружено квантовохимически изменение электронной структуры  $[Fe(3-OMe-Sal_2trien)]^+$ , происходящее при изменении конформации лиганда в процессе спинового перехода. Предложены модели, описывающие температурную зависимость магнитного поведения спин-переменных солей  $[Fe^{III}(3-OMe-Sal_2trien)][Fe^{III}(tdas)_2] \cdot CH_3CN$  и  $Li[Fe(thpy)_2] \cdot 3H_2O$ . Обнаружено запаздывание структурной перестройки при спиновом переходе в полиморфной модификации соли  $K[Fe(5Cl-thsa)_2]$  с разупорядоченным катионом  $K^+$ . Проведены DFT расчеты и установлены особенности электронного строения анионных комплексов  $[Fe(5Cl-thsa)_2]^-$  и  $[Fe(thpy)_2]^-$ .

Диссертантом проведена большая, сложная, систематическая экспериментально-теоретическая работа, которая включала синтез

комплексов железа с серией лигандов, их широкое физико-химическое исследование и квантово-химические расчеты разного уровня теории. Достоверность выполненных автором исследований не вызывает сомнений. По теме диссертации опубликованы 6 статей в высокорейтинговых журналах по профилю исследования; основные результаты апробированы на международных и российских конференциях.

Диссертационная работа Благова Максима Андреевича по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а ее автор, Благов М.А., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

**Лукова Галина Викторовна,**

доктор химических наук (специальность 02.00.04 – физическая химия),  
ведущий научный сотрудник Лаборатории органической и  
супрамолекулярной фотохимии Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем  
химической физики и медицинской химии Российской академии наук

16 октября 2023 г.

Почтовый адрес: 142432, г. Черноголовка, проспект Академика Семенова, 1,  
ФГБУН Федеральный исследовательский центр проблем химической физики  
и медицинской химии РАН

Тел.: +7(496)5227244

gloukova@icp.ac.ru