

### **Заключение диссертационного совета МГУ.014.3**

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «03» ноября 2023 г. № 161

о присуждении Благову Максиму Андреевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Комплексы Fe(III) на основе гекса- ( $N_4O_2$ ) и тридентатных (ONS) лигандов, обладающие термически индуцированным спиновым переходом» по специальности 1.4.4 – физическая химия (химические науки) принята к защите диссертационным советом 29 сентября 2023, протокол №153.

Соискатель Благов Максим Андреевич, 1995 года рождения, в 2023 году окончил аспирантуру факультета фундаментальной физико-химической инженерии МГУ имени М.В. Ломоносова.

Соискатель работает младшим научным сотрудником в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Федеральном исследовательском центре проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории молекулярных проводников и магнетиков отдела строения вещества Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук.

Научный руководитель – кандидат химических наук, старший научный сотрудник Спицына Наталья Германовна, ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярных проводников и магнетиков отдела строения вещества Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

1. Пресняков Игорь Александрович, доктор физико-математических наук, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра радиохимии, лаборатория ядерно-химического материаловедения, ведущий научный сотрудник;

2. Романенко Галина Владиславовна, доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук, Лаборатория многоспиновых координационных соединений, главный научный сотрудник;

3. Нелюбина Юлия Владимировна, доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Лаборатория «Центр исследования строения молекул», ведущий научный сотрудник;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 11 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 6 статей общим объемом 4 п.л., опубликованных в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4–физическая химия (химические науки):

1. **Blagov M.A.**, Spitsyna N.G., Ovanesyan N.S., Lobach A.S., Zorina L.V., Simonov S.V., Zakharov K.V., Vasiliev A.N. First crystal structure of an Fe(III) anionic complex based on a pyruvic acid thiosemicarbazone ligand with  $\text{Li}^+$ : synthesis, features of magnetic behavior and theoretical analysis // Dalton Transactions. 2023. V. 52. P. 1806–1819. DOI: 10.1039/D2DT03630D. (0,75 п.л., вклад Благова М.А. составляет 40%, JIF 4,174 WoS).

2. Спицына Н.Г., Ованесян Н.С., **Благов М.А.** Сравнительное исследование нитрата и йодида переменного по спине катиона железа(III) с координационным узлом  $\text{N4O2}$  методом мессбауэровской спектроскопии // Химическая Физика. 2022. Т. 41. № 7. С. 1–8. DOI: 10.31857/S0207401X22070159. (0,39 п.л., вклад Благова М.А. составляет 70 %, импакт-фактор 1,085 РИНЦ).

3. **Благов М.А.**, Крапивин В.Б., Симонов С.В., Спицына Н.Г. Взаимосвязь параметров координационного октаэдра и конформации лиганда при спиновом переходе в катионном комплексе  $[\text{N,N}'\text{-3,6-диазооктан-1,8 диилбис(салицилиденальдиминато)}]\text{-железа(III) } [\text{Fe}^{\text{III}}(\text{Sal}_2\text{trien})]^+$  // Известия Академии наук. Серия химическая. 2022. № 7. С. 1394–1401. DOI: 10.1007/s11172-022-3545-8. (0,38 п.л., вклад Благова М.А. составляет 70 %, импакт-фактор 1,502 РИНЦ).

4. Spitsyna N.G., **Blagov M.A.**, Lazarenko V.A., Svetogorov R.D., Zubavichus Y.V., Zorina L.V., Maximova O., Yaroslavtsev S.A., Rusakov V.S., Raganyan G.V., Yagubskii E.B., Vasiliev A.N. Peculiar spin crossover behavior in the 2D polymer  $\text{K}[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{5Cl-thsa})_2]$  // Inorganic Chemistry. 2021. V. 60. № 23. P. 17462–17479. DOI:10.1021/acs.inorgchem.1c01821. (1,2 п.л., вклад Благова М.А. составляет 20 %, JIF 4,660 WoS).

5. Spitsyna N., Ovanesyanyan N., **Blagov M.**, Krapivin V., Lobach A., Dmitriev A., Simonov S., Zorina L., Pilia L., Deplano P., Vasiliev A., Maximova O., Yagubskii E. Multi-magnetic properties of a novel SCO [Fe(3-OMe-Sal<sub>2</sub>trien)][Fe(tdas)<sub>2</sub>] $\cdot$ CH<sub>3</sub>CN salt // European Journal of Inorganic Chemistry. 2020. V. 48. P. 4556–4567. DOI: 10.1002/ejic.202000873. (0,8 п.л., вклад Благова М.А. составляет 20 %, JIF 2,248 WoS).

6. Spitsina N.G., **Blagov M.A.**, Lazarenko V.A., Zorina L.V., Vasiliev A.N., Krapivin V.B., Svetogorov R.D., Maximova O.V., Simonov S.V., Yagubskii E.B. Spin-crossover behavior of neutral iron(III) complexes with salicylaldehyde thio-, seleno- and semicarbazone ligands: experiment and theoretical analysis // Dalton Transactions. 2019. V. 48. P. 9328–9336. DOI: 10.1039/c9dt01404g. (0,48 п.л., вклад Благова М.А. составляет 20 %, JIF 4,174 WoS).

На диссертацию и автореферат поступило 4 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии, кристаллохимии и магнетохимии, а также наличием публикаций в рецензируемых периодических научных изданиях по проблемам, связанных с предметом диссертационного исследования.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований показана взаимосвязь между кристаллической структурой, электронным строением и магнитными свойствами комплексов Fe(III) на основе гекса- (N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>) и тридентатных (ONS) лигандов, обладающих термически индуцированным спиновым переходом.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Новый метод определения спинового состояния Fe(III) в комплексных катионах [Fe(R-Sal<sub>2</sub>trien)]<sup>+</sup> по конформационному состоянию этиленовых мостиков гексадентатного (N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>) лиганда R-Sal<sub>2</sub>trien<sup>2-</sup> позволяет получать количественную информацию о магнитных свойствах комплексов.

2. Изменение конформации этиленовых мостиков гексадентатного ( $N_4O_2$ ) лиганда  $R-Sal_2trien^{2-}$  в  $[Fe(III)(R-Sal_2trien)]^+$  связано с изменением характера  $\sigma$ -связывания лиганда с центральным атомом комплекса  $Fe(III)$  в результате его стабилизации в различных спиновых состояниях.

3. Внешнесферный катион щелочного металла определяет характер спинового перехода в анионных комплексах  $Fe(III)$  на основе тиосемикарбазонов 5-хлорсалицилальдегида и пировиноградной кислоты.

4. Стабилизация низкоспинового ( $S=1/2$ ) состояния в анионных комплексах  $Fe(III)$  на основе тиосемикарбазонов замещенных *o*-оксибензальдегидов и пировиноградной кислоты определяется  $\sigma$ -связью  $Fe-N_{im}$ .

На заседании 03 ноября 2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Благову М.А. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4 – физическая химия (химические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 15, «против» – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета

д.х.н., доцент Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета

к.х.н., доцент Шилина М.И.

03.11.2023