

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Андреевой Александры Юрьевны «Исследование косвенных обменных взаимодействий в многоядерных комплексах лантаноидов ($\text{Ln(III)}=\text{Gd, Th, Dy, Ho, Er, Yb}$)», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

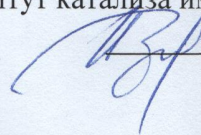
Диссертация посвящена экспериментальному и теоретическому изучению магнитных свойств полиядерных комплексов лантаноидов – актуальному направлению, связанному с поиском новых материалов с особыми магнитными и люминесцентными свойствами. Основной акцент работы сделан на исследовании обменных взаимодействий между катионами f -элементов через мостиковые кислородные центры. Работа производит прекрасное впечатление благодаря использованию нескольких экспериментальных методов в соединении с теоретическим моделированием. Это позволило автору обеспечить достоверность результатов и получить несколько новых результатов. В частности, впечатляет найденный автором антиферромагнитный характер взаимодействий в 4-х и 5-ядерных комплексах. Очень интересным и новым фактом является отсутствие корреляции между углами Ln-мостиковый атом-Ln и типом связывания магнитных моментов Ln, демонстрируя качественное отличие от комплексов d -металлов.

Замечание: Автор отмечает, что для 4-ядерных комплексов 1Ln и 2Ln имеется слабая зависимость между энергией $O1s$ и константой обменного взаимодействия, исчезающая для примерно таких же энергий $O1s$ 5-ядерных комплексов 3Ln (Рисунок 12). Данное противоречие ставит под сомнение гипотезу о том, что мостиковый кислород «переключает» магнитный порядок в изученных комплексах. Нужны какие-то дополнительные аргументы в поддержку такого механизма косвенного обмена. Вопрос можно было бы прояснить, например, в прямом DFT расчете описанных комплексов.

Указанное замечание не влияет на положительную оценку работы. Диссертация Андреевой А.Ю. является законченным исследованием, выполненным на высоком научном уровне. По научной новизне, теоретической и практической значимости представленная диссертация отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 02.00.04 – физическая химия, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Отзыв составил: Зильберберг Игорь Леонидович

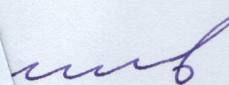
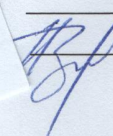
Доктор хим. наук, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии
ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К.Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»

 И.Л. Зильберберг

630090, г. Новосибирск
пр. Лаврентьева, д.5
+7(383)326-94-19, I.L.Zilberberg@catalysis.ru

13 января 2020 г.

Подпись И.Л. Зильберберга заверяю
Ученый секретарь Института катализа
Доктор химических наук
Согласен на обработку персональных данных


Д.В. Козлов
 И.Л. Зильберберг

ИНХ СО РАН
ВХ. № 153 25-110
ОТ 13.01.20