

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Федоренко Анастасии Дмитриевны «Рентгеноэлектронное и рентгеноспектральное исследование электронного строения стабильных нитроксильных радикалов и комплексов переходных металлов на их основе», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия

Диссертационная работа Федоренко Анастасии Дмитриевны посвящена изучению особенностей электронного строения свободных нитроксильных радикалов и комплексов новых молекулярных магнетиков на основе нитроксильных радикалов и комплексов меди с помощью рентгеновской эмиссионной и фотоэлектронной спектроскопии. Молекулярные магнетики обладают интересными физико-химическими свойствами и являются перспективными материалами для современной техники. Поэтому исследование электронного строения молекулярных магнетиков является весьма актуальной задачей физики и химии.

Диссертационная работа выполнена на высоком экспериментальном уровне с привлечением ряда расчетов электронной структуры, для объяснения экспериментальных результатов. Данное обстоятельство является сильной стороной диссертационной работы.

Личный вклад автора отражен в автореферате и сомнений не вызывает. Достоверность полученных экспериментальных данных, научных положений и выводов обеспечивается корректностью постановки цели работы, решаемых задач, их физической обоснованностью, хорошим уровнем экспериментальных и теоретических исследований. Диссертант корректно использует научные методы обоснования полученных результатов. Обоснованность полученных выводов обеспечивается их непротиворечивостью и согласием с существующими представлениями по исследованию фундаментальных свойств молекулярных магнетиков.

По работе имеются следующие замечания.

- Несколько неудачно сформулированы положения, выносимые на защиту. Конкретные результаты исследования электронной структуры рассмотренных в диссертационной работе материалов в защите не нуждаются. Непонятным является последнее положение — методики интерпретации. Что именно подразумевается под этой фразой?



- Имеются замечания по оформлению автореферата. Так, на стр. 20 в подписях к рис. 12 перепутаны обозначения спектров. В таблице 1 на стр. 11 структуры R5 и R6 приведены идентичными. Отсутствуют описания функционала PW86-PW91 и базиса (стр 8).

Отмеченные недостатки не затрагивают существа работы и, в основном, касаются ее оформления. Результаты являются новыми, достоверными, практически важными, а сделанные выводы — обоснованными. Публикации достаточно полно отражают содержание диссертации. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу и может быть классифицирована как решение задачи, имеющей существенное значение для физической химии: *Установление электронного строения свободных нитроксильных радикалов.*

Высокий научный уровень и большой объем выполненных исследований, значимость и достоверность результатов — все это позволяет сделать вывод, что диссертация Федоренко А. Д. соответствует всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, Федоренко Анастасия Дмитриевна, заслуживает ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
лаборатории рентгеновской спектроскопии
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института физики металлов
им. М. Н. Михеева УрО РАН
тел.: (343) 378-36-92
e-mail: shamin@ifmlrs.uran.ru



Шамин Сергей Николаевич

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики металлов им. М. Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук
620137 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
тел.: (343) 374-02-30; факс: (343) 374-52-44
e-mail: physics@imp.uran.ru

