

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Евгения Михайловича Кадиленко
«**Квантовохимические расчеты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами**», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Установление взаимосвязи химической структуры на молекулярном уровне с электронными и магнитными свойствами магнитоактивных соединений является актуальной задачей в связи с их возможным применением в области хранения информации с высокой плотностью записи. Представленные в диссертационной работе квантовохимические исследования электронной структуры отдельных магнитных центров и магнитных взаимодействий между ними позволили достичь детального понимания магнитных свойств изученных материалов и провести интерпретацию экспериментальных результатов на молекулярном уровне, а также подсказали экспериментаторам направления для синтеза новых соединений с улучшенными свойствами. Крайне важно, что вся работа выполнялась в прямом контакте с экспериментаторами. Представленные результаты в полной мере характеризуют научную новизну диссертационного исследования.

Следует отметить, что объектами исследования выбраны нетривиальные, сложные структуры, в том числе являющиеся магнитными мотивами соединений, синтезированных коллегами-экспериментаторами из ИНХ, НИОХ, МТЦ СО РАН, ИОНХ РАН. Это соли анион-радикалов производных халькогендиазолов с диамагнитными и парамагнитными катионами, производные бензотеллурадиазола и его мономерный анион-радикал, комплексы Mn(II), Ni(II), Fe(II) с парамагнитными и неионноцентным лигандами. Работа с такими объектами требует применения особых теоретических методов и подходов, а главное умения ими пользоваться. Всё это в значительной мере представлено в диссертационной работе Кадиленко Е.М., в частности: применение высокоуровневых методов CASSCF/NEVPT2 с перебором базисов и активного пространства; использование разных релятивистских подходов (в случае комплексов теллура); сравнение результатов, полученных в рамках высокоточных методов, с результатами, предоставляемыми в рамках функционала плотности нарушенной симметрии (BS-DFT).

Диссертационная работа Кадиленко Е.М. представляет и значительный методический интерес. Выполненные исследования позволили выработать расчетную методику, позволяющую корректно предсказывать магнитные мотивы материалов на основе солей анион-радикалов и комплексов переходных металлов. Было показано полуколичественное согласие результатов, предоставляемых методами BS-DFT с высокоуровневыми расчетами в случае ковалентно несвязанных пар радикал...радикал, анион-радикал...анион-радикал и катион d-металла...катион d-металла. Установлено, что только релятивистские расчеты с использованием релятивистского гамильтониана ZORA и орбиталей слейтеровского типа находятся в хорошем согласии с экспериментом для производного бензотеллурадиазола. Объяснен переход анион-радикала соли триадиазолотриадиазолидила с катионом бис(бензол)хрома(I) в состояние слабого ферромагнетизма. Все эти результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом.

Для целей исследования специально была разработана компьютерная программа Spinner, аппроксимирующая экспериментальные температурные зависимости магнитной восприимчивости посредством заданного магнитного мотива слабо взаимодействующих кластеров. Стоит отметить, что эта программа имеет практическое применение для анализа магнитных свойств широкого класса магнитоактивных соединений.

Грамотное использование расчетных методик с разработанной автором компьютерной программой Spinner и внимательное сопоставление результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными не оставляет сомнений в надежности полученных результатов и достоверности сделанных на их основе выводов. Материалы исследования изложены в пяти работах, опубликованных в высокорейтинговых журналах, входящих в Перечень ВАК.

В автореферате присутствует ряд опечаток и сложно воспринимаемых предложений. Для лучшего понимания следовало бы разбить на несколько предложений цель и первый пункт научной новизны, а также привести уровень используемого высокоточного расчета в таблице 5 автореферата. Вышеперечисленные замечания, однако, никак не влияют на общее хорошее впечатление о работе и высокую значимость полученных результатов.

Диссертационная работа Кадиленко Е.М. представляет собой цельное научное исследование, выполненное на очень высоком профессиональном уровне, по актуальности и объему выполненных исследований, новизне полученных результатов и значимости сформулированных выводов соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия. Автор работы, Евгений Михайлович Кадиленко, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по указанной специальности.

Орел Владимир Борисович
кандидат химических наук
специальность 02.00.04 – Физическая химия

Ведущий научный сотрудник лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО ИГУ)

664003 г. Иркутск, ул. Карла Маркса, 1

Тел. +7 (395) 252 12 11

Электронная почта: orelv@isu.ru

22.05.2023

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку



Витковская Надежда Моисеевна
доктор химических наук

специальность 02.00.04 – Физическая химия, 02.00.03 – Органическая химия

Ведущий научный сотрудник лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО ИГУ)

664003 г. Иркутск, ул. Карла Маркса, 1

Тел. +7 (395) 252 12 11

Электронная почта: vita@cc.isu.ru

22.05.2023

Согласна на включение моих персональных данных в докумен..., связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку

