

## ОТЗЫВ

**на автореферат диссертационной работы Кадиленко Евгения Михайловича  
«Квантовохимические расчёты 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**

Работа Кадиленко Е.М. посвящена теоретическому исследованию с использованием современных методов квантовой химии комплексов переходных металлов с органическими лигандами, а также солей анион-радикалов халькоген-азотных гетероциклических соединений. Актуальность выполненной работы обусловлена необычными магнитными свойствами данных соединений, а также их полифункциональностью ввиду возможности их применения в качестве строительных блоков молекулярных магнитных, проводящих и фотопроводящих материалов. Сильными позициями в синтезе подобных магнитоактивных соединений обладают лаборатории института НИОХ СО РАН. Представляемая работа Евгения Михайловича является результатом его тесного сотрудничества с данным институтом, безусловно обладает новизной и высокой значимостью как для класса халькогенадиазолов, а также комплексов 3d-металлов с парамагнитными и редокс-активными лигандами, так и для области молекулярного магнетизма в целом. Корректная интерпретация регистрируемых для сложных в плане магнитного поведения температурных зависимостей магнитной восприимчивости и эффективного магнитного момента комплексов 3d-металлов с парамагнитными и редокс-активными лигандами как правило невозможна без учета дополнительной информации, полученной дополнительными экспериментальными техниками (рентгеноструктурный анализ, ЭПР- и ИК-спектроскопия, калориметрия) и современными методами квантовой химии. Современные методы квантовой химии применительно к изучаемому классу систем в руках грамотного специалиста могут давать действительно впечатляюще исчерпывающую и правдивую информацию, критически необходимую экспериментаторам, что и было продемонстрировано в данной дипломной работе.

Диссертационная работа состоит из введения, литературного обзора, главы с описанием методик квантовохимических расчетов в общем и моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости в частности, главы с результатами анализа магнитных свойств анион-радикалов халькогенадиазолов и их гомо- и гетероспиновых солей, главы с результатами анализа магнитных свойств комплексов 3d-металлов с парамагнитными и неинноцентными редокс-активными лигандами, раздела с результатами и выводами и списка литературы.

Диссертационная работа Кадиленко Евгения Михайловича является законченным исследованием, проведенном на высоком научном уровне. Поставленные автором задачи были успешно решены, что потребовало от автора навыков проведения искусных и трудоемких квантовохимических расчетов. Отдельно стоит подчеркнуть очень подробный и лаконичный стиль изложения материала. Научные результаты работы обладают безусловной новизной, их достоверность не вызывает сомнения, выводы, сделанные автором, обоснованы и в полной мере отражают достигнутые результаты.

Автореферат диссертационной работы хорошо оформлен и хорошо читается. Отдельно стоит подчеркнуть очень сбалансированный и лаконичный стиль изложения материала автореферата.

Считаю, что диссертационная работа «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п.п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в текущей редакции), а ее автор, Кадиленко Евгений Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Вебер Сергей Леонидович

кандидат физико-математических наук

специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

заместитель директора по науке

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт «Международный томографический центр»

Сибирского отделения Российской академии наук (МТЦ СО РАН)

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3а

Тел. 8(383) 333 14 60, электронная почта: sergey.veber@tomo.nsc.ru

26.04.2023

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

Подпись Вебера С.Л. заверяю

Ученый секретарь МТЦ СО РАН

к.х.н.

Дата

26.04.2023



Л.В. Яньшолё