

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»**

представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. – физическая химия.

Развитие средств вычислений, хранения и передачи информации на новом этапе требует создание принципиально новых материалов, которые должны обладать не уступающими магнитными или проводниковыми свойствами современным материалам, используемым в микроэлектронике. Область же применения подобных материалов требует значительного расширения. Перспективным классом соединений для построения материалов с магнитными свойствами являются органические соли с парамагнитными центрами. Магнитные и физико-химические свойства именно таких соединений были исследованы автором в своей диссертационной работе при помощи методов квантовой химии и компьютерного моделирования.

В квалификационной работе основное изучение было направлено автором на три серии соединений: 1 – с 3d металлами Mn(II) и Ni(II); 2 – гомоспиновые соли анион-радикала; 3 – комплексы железа Fe. Для выполнения поставленных задач автором были использованы методы DFT с нарушенной симметрией и многоконфигурационный CASSCF, а оценка обменного взаимодействия между парамагнитными центрами происходила в рамках модели Гейзенберга-Дирака-ван-Флека. Также, для нахождения параметров спин-гамильтониана серии комплексов железа Fe (dpp-BIAN)₂ (dpp-BIAN-1,2-бис[(2,6-диизопропилфенил)имино]аценафтен) по экспериментальной зависимости магнитной восприимчивости от температуры автором была разработана и использованная программа Spinner.

Серьезных недостатков в работе не выявлено, большинство расчётных результатов согласуются с экспериментом, расхождения объяснены достаточно ясно и полно.

Работа Е. М. Кадиленко исполнена на высоком научном и методическом уровне. Результаты работы были опубликованы в пяти научных статьях в высокорейтинговых журналах и были доложены на шести международных и всероссийских конференциях, что ещё раз подтверждает высокое качество проделанной работы, и надёжность результатов.

Благодаря своей актуальности, научной новизне, объёму выполненных исследований и практической значимости полученных результатов, представленная диссертационная работа полностью 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). Автор работы, Кадиленко Евгений Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Доктор физико-математических наук,
руководитель Отделения перспективных разработок и
заведующий лабораторией квантовой химии
Федерального государственного бюджетного учреждения
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,
профессор кафедры квантовой механики физического факультета СПбГУ

Титов Анатолий Владимирович



Контактные данные:

Телефон: +7 (81371) 310-55

Электронная почта: titov_av@pnpi.nrcki.ru

05 ИЮН 2023

Адрес места работы:

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, ФГБУ
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

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

Подпись руки Титова А.В. заверяю:



Ученый секретарь
Воробьев С.И.