

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертационной работы Кадиленко Евѣния Михайловича
«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**

Работа Кадиленко Е.М. посвящена высокоуровневым квантовохимическим расчетам электронной структуры и магнитных свойств ряда новых молекулярных магнитных материалов. Актуальность данной работы обусловлена высокой потребностью в новых функциональных материалах с заданными характеристиками, в том числе магнитными и электрическими свойствами. В работе рассмотрены молекулярные магнетики на основе солей анион-радикалов халькогендиазолов, бензотеллурадиазола, комплексов 3d-металлов с парамагнитными и неинноцентными лигандами. Объекты исследования данной диссертационной работы были синтезированы и охарактеризованы в ИНХ СО РАН, НИОХ СО РАН и ИОНХ РАН, что в очередной раз подтверждает активность исследований в области молекулярного магнетизма. Для детального понимания свойств молекулярных магнетиков необходимо установление корреляций между данными ряда экспериментальных методов, таких как магнетохимия, РСА, ЭПР и другие спектроскопические методы, а также сравнение экспериментальных результатов и теоретических расчетов. В частности, важной задачей магнетохимии является изучение обменно-связанных систем, в контексте которого практически незаменимыми являются квантовохимические расчеты: они позволяют выявить наиболее значимые обменные взаимодействия, установить магнитный мотив образца, а также рациональным образом выбрать модель для описания экспериментальных магнитных свойств соединения. Такие исследования обменных взаимодействий были выполнены в рамках диссертации Кадиленко Е.М. Мне кажется необходимым особенно подчеркнуть тщательность сравнения полученных расчетных результатов с экспериментальными данными, которую проявил автор диссертационной работы.

Автореферат работы написан хорошим языком и хорошо читается. Материалы изложены очень последовательно и логично.

Автореферат работы Кадиленко Е.М. позволяет сделать выводы, что работа выполнена на современном научном уровне, полученные расчетные результаты корректно обсуждены, проведено сравнение с экспериментальными данными, выводы не вызывают

сомнений. Считаю, что диссертационная работа «Квантовохимические расчеты 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.

Летягин Глеб Андреевич

кандидат физико-математических наук

специальность 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

младший научный сотрудник

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт «Международный томографический центр»

Сибирского отделения Российской академии наук (МТЦ СО РАН)

630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3А

Тел.: 8 (383) 330 81 14, электронная почта: gl@tomo.nsc.ru

13.06.2023

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

Подпись Летягина Г.А. заверяю

Ученый секретарь МТЦ СО РАН

к.х.н.

Дата

Подпись Летягина Г.А.
заверяю.
Ученый секретарь МТЦ СО РАН
Л.В. Янышев к.х.н.
13.06.2023