

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.086.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ КАДИЛЕНКО ЕВГЕНИЯ МИХАЙЛОВИЧА НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 14 июня 2023 года № 14

О присуждении Кадиленко Евгению Михайловичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами» в виде рукописи по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 22.03.2023 г. (протокол заседания № 5) диссертационным советом 24.1.086.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), Минобрнауки России, 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012 г. № 105/нк.

Соискатель Кадиленко Евгений Михайлович, 07 января 1996 года рождения, в 2018 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (НГУ) по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия». В 2018-2022 гг. Кадиленко Евгений Михайлович прошел обучение в очной аспирантуре по специальности 04.06.01 «Химические науки»; с октября 2018 г. и по настоящее время работает младшим научным сотрудником в Лаборатории квантовой химии и компьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Минобрнауки России.

Диссертация выполнена в Лаборатории квантовой химии и компьютерного моделирования ИХКГ СО РАН, Минобрнауки РФ.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Грицан Нина Павловна, заведующая Лабораторией квантовой химии и компьютерного моделирования ИХКГ СО РАН.

Официальные оппоненты:

Трофимов Александр Борисович, доктор химических наук, профессор РАН, ведущий научный сотрудник Лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем, профессор Кафедры физической и коллоидной химии, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет»;

Юданов Илья Валерьевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Группы теоретической и вычислительной химии твердого тела, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук», г. Нижний Новгород, в своем положительном отзыве, подписанном заместителем директора доктором химических наук, профессором РАН Пискуновым Александром Владимировичем, подготовленным Кетковым Сергеем Юлиевичем, доктором химических наук, заведующим Лабораторией строения металлоорганических и координационных соединений, указала, что диссертационная работа Е.М. Кадиленко на тему «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами», представленная к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, является законченным фундаментальным научным исследованием, которое по объему выполненных исследований, актуальности, научной новизне и практической значимости соответствует требованиям, изложенным в п. 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в редакции от 20.03.2021 г.), а ее автор, Кадиленко Евгений Михайлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия. Отзыв на диссертацию обсужден и утвержден на заседании ученого совета ИМХ РАН (протокол № 6 от 27 апреля 2023 г.).

Соискатель имеет 5 опубликованных работ по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях. Все журналы входят в Перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертационных исследований, и индексируются базами данных Web of Science и Scopus. Общий объем опубликованных по теме диссертации работ составляет 51 стр. (3,2 печ. л.), личный вклад автора – 1,5 печ. л. Недостоверные сведения о работах, опубликованных автором диссертации, отсутствуют.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Y. Shuku, Y. Hirai, N.A. Semenov, **E.M. Kadilenko**, N.P. Gritsan, A.V. Zibarev, O.A. Rakitin, K. Awaga 3D molecular network and magnetic ordering, formed by multi-dentate magnetic copolymers, bis(benzene)chromium(I) and [1,2,5]thiadiazolo[3,4-c][1,2,5] thiadiazolidyl // Dalton Transactions, 2018, Vol. 47, № 29, P. 9897-9902.
2. N.A. Semenov, E.A. Radiush, E.A. Chulanova, A.M.Z. Slawin, J.D. Woollins, **E.M. Kadilenko**, I.Y. Bagryanskaya, I.G. Irtegora, A.S. Bogomyakov, L.A. Shundrin, N.P. Gritsan, A.V. Zibarev Design, synthesis and isolation of a new 1,2,5-selenadiazolidyl and structural and magnetic characterization of its alkali-metal salts // New Journal of Chemistry, 2019, Vol. 43, № 41, P. 16331-16337.
3. P.A. Petrov, **E.M. Kadilenko**, T.S. Sukhikh, I.V. Eltsov, A.L. Gushchin, V.A. Nadolinny, M.N. Sokolov, N.P. Gritsan A Sterically Hindered Derivative of 2,1,3-Benzotelluradiazole: A Way to the First Structurally Characterised Monomeric Tellurium–Nitrogen Radical Anion // Chemistry – A European Journal, Vol. 26, № 64, P. 14688–14699.
4. **E.M. Kadilenko**, N.P. Gritsan, E.V. Tretyakov, S.V. Fokin, G.V. Romanenko, A.S. Bogomyakov, D.E. Gorbunov, D. Schollmeyer, M. Baumgarten, V.I. Ovcharenko A black-box approach to the construction of metal-radical multispin systems and analysis of their magnetic properties // Dalton Transactions, 2020, Vol. 49, № 46, P. 16916-16927.
5. D.S. Yambulatov, S.A. Nikolaevskii, M.A. Kiskin, K.V. Kholin, M.N. Khrizanforov, Yu.G. Budnikova, K.A. Babeshkin, N.N. Efimov, A.S. Goloveshkin, V.K. Imshennik, Yu.V. Maksimov, **E.M. Kadilenko**, N.P. Gritsan, I.L. Eremenko Generation of a Hetero Spin Complex from Iron(II) Iodide with Redox Active Acenaphthene-1,2-Diimine // Molecules, 2021, Vol. 26, № 10, 2998 (1-14).

На диссертацию и автореферат диссертации поступило **пять** отзывов. Все отзывы положительные, два отзыва содержат замечания. Отзывы поступили от:

1. **Немухина Александра Владимировича**, доктора химических наук, профессора кафедры физической химии ФГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»;
2. **Орла Владимира Борисовича**, кандидата химических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет» и **Витковской Надежды Моисеевны**, доктора химических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет»;
3. **Вебера Сергея Леонидовича**, кандидата физико-математических наук, заместителя директора по науке ФГБУН Институт «Международный томографический центр» СО РАН (без замечаний);
4. **Титова Анатолия Владимировича**, доктора физико-математических наук, руководителя Отделения перспективных разработок и заведующего лабораторией квантовой химии ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (без замечаний);
5. **Летягина Глеба Андреевича**, кандидата физико-математических наук, младшего научного сотрудника ФГБУН Институт «Международный томографический центр» СО РАН (без замечаний).

Замечания и вопросы к автореферату носят уточняющий и рекомендательный характер и не ставят под сомнение достоверность полученных результатов и выводов: пункт 1 результатов и выводов не является выводом, да и к результатам относится с трудом – что значит «проектирование» компьютерной программы, что значит «с целью адаптации для параллельных вычислений»? Цель была достигнута или нет? Первое утверждение в пункте 6 результатов и выводов довольно тривиально, а второе утверждение сомнительно, поскольку проверено только для небольшого числа конкретных примеров. Также довольно неудачно сформулирован пункт 5 из списка выносимых на защиту положений. 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. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Кадиленко Евгения Михайловича **полностью соответствует** требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью данных экспертов в области квантовой химии и магнетохимии, подтверждается наличием у оппонентов и сотрудников ведущей организации публикаций по данной тематике в профильных журналах.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

объяснен рост значений магнитной восприимчивости при криогенных температурах соли триадиазолотиадиазолидила с катионом бис(бензол)хрома(І) явлением слабого ферромагнетизма;

доказано, что различное магнитное поведение солей анион-радикала 5,6-дициано[1,2,5]селенодиазола[3,4-b]пиразина обусловлено формированием антиферромагнитно связанных пар анион радикалов (AP) для солей калия и цепочек магнитно практически не взаимодействующих AP для натриевых солей;

показано, что нетипичное плоское строение окружения атома Te в замещенном теллурадиазольном гетероцикле и его анион-радикальной соли обусловлено донорно-акцепторным механизмом образования связи Te–O;

установлена электронная структура комплекса $\text{Fe}(\text{dpp-BIAN})\text{I}_2$, а также *объяснено* отсутствие поведения мономолекулярного магнита у этого комплекса;

проведено моделирование экспериментальных температурных зависимостей магнитной восприимчивости дидерных комплексов Mn(II) и Ni(II) с нитронил-нитроксильными и иминонитроксильными дирадикалами, обладающих сложной системой обменных каналов между шестью парамагнитными центрами.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

предложена методика расчета СТВ-тензора на ядре атома теллура, приводящая к наилучшему согласию с экспериментом;

предложена методика расчетов параметров обменных взаимодействий в системах, состоящих из парамагнитных органических лигандов и катионов 3d-металлов, приводящая к наиболее точным расчетным результатам.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработана компьютерная программа для аппроксимации экспериментальных температурных зависимостей магнитной восприимчивости посредством параметризации модельным спин-гамильтонианом, данная программа может быть применена для анализа магнитных свойств широкого класса магнитоактивных соединений.

Оценка достоверности результатов исследования выявила высокий уровень работы. Достоверность представленных результатов обеспечена квалифицированным использованием современных высокоуровневых расчетных методов, согласованностью расчетных данных, сопоставлением расчетных и экспериментальных данных, а также сравнением с литературой. Публикации в рецензируемых международных журналах свидетельствуют о значимости полученных данных и их признании мировым научным сообществом.

Личный вклад соискателя заключается в непосредственном участии в постановке целей и задач исследования. Все квантовохимические расчеты, а также моделирование температурных зависимостей магнитной восприимчивости, были выполнены автором. Программа для моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости была спроектирована и реализована лично автором. Подготовка материалов к публикации проводилась совместно с руководителем и соавторами.

Синтез исследованных соединений, получение температурных зависимостей магнитной восприимчивости для них, а также кристаллографических и спектроскопических данных, были проведены соавторами и полученные данные были предоставлены автору для дальнейшего анализа.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: температурная зависимость формы ЭПР-спектра производного теллура может быть связана с изменением фазового состояния образца, а не с неполным усреднением анизотропии тензора СТВ, как предполагает соискатель; неясно, что подразумевается под термином «магнитный мотив».

Соискатель Кадиленко Е.М. ответил на задаваемые в ходе заседания вопросы и пояснил, что при 77 К раствор находится в стеклообразном состоянии и сравнение его спектра ЭПР со спектром жидкого раствора представляется корректным; под магнитным мотивом в докладе подразумевалась совокупность магнитных центров и каналов взаимодействия между ними.

На заседании 14 июня 2023 г., протокол № 14, диссертационный совет принял решение за проведенное систематическое исследование, посвященное квантовохимическим расчетам электронной структуры и моделированию магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами, являющееся важной научной задачей и вносящее существенный вклад в фундаментальные знания в области магнетохимии, результаты которого могут быть использованы для создания новых магнитных материалов, присудить Кадиленко Евгению Михайловичу ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 24 (двадцати четырех) человек, из них 6 (шесть) докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 32 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 24 (двадцать четыре), против – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Председатель диссертационного совета
д.х.н., чл.-к. РАН

Федин Владимир Петрович

Ученый секретарь диссертационного совета
д.х.н., доцент

Потапов Андрей Сергеевич

14 июня 2023 г.

Подпись
ЗАВЕРЯЮ
УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
« 14 » - 06 2023
ФЕДИНА В. П.,
ПОТАПОВА А. С.,
О. А. ГЕРАСЬКО
ИНХ СО РАН
МНОГОУЧЕБНИЦА
РОССИЙСКОГО АКАДЕМИЧЕСКОГО
СОВЕТА (И. А. С. СО РАН)