

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Федоренко Анастасии Дмитриевны "Рентгеноэлектронное и рентгеноспектральное исследование электронного строения стабильных нитроксильных радикалов и комплексов переходных металлов на их основе" на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа Федоренко А.Д. посвящена исследованию электронного строения нитроксильных радикалов и гетероспиновых комплексов меди с нитроксильными лигандами. Данный класс соединений в настоящее время вызывает большой интерес в связи с поиском веществ, которые могут быть использованы для создания новых материалов – молекулярных магнетиков.

Применение высокохарактеристических физических методов (РФЭС, РЭС) позволяет получить важную информацию об особенностях электронного и пространственного строения исследуемых соединений: об энергиях ВЗМО свободных стабильных радикалов и комплексов с нитроксильными радикалами, о парциальном атомном составе соответствующих МО, о характере распределения интегральной и спиновой плотности в изучаемых соединениях. Привлечение методов РФЭС и РЭС для изучения особенностей их электронного и пространственного строения является важной особенностью рассматриваемой работы и носит, несомненно, приоритетный характер.

В диссертации Федоренко А.Д. получены интересные и важные данные о характере распределения спиновой плотности на атомах радикалов в зависимости от их строения. Рассмотрены возможные каналы делокализации электронной и спиновой плотности при координации нитроксильного радикала к атому металла при образовании нитроксильных комплексов меди(II). На основании изученных РФЭС O1s-, N1s-, C1s-спектров определены зарядовые состояния атомов углерода, азота и кислорода в свободных радикалах, а также при координации радикала к атому меди. В работе показано, что при



интерпретации рентгеноэлектронных спектров нитроксильных радикалов необходимо учитывать проявление в спектрах интенсивной сателлитной структуры, характер которой зависит от спинового состояния системы, от строения радикала и его ближайшего окружения. Соответствующий результат является важнейшим достижением работы, который необходимо учитывать при применении методов РФЭС и РЭС для изучения электронного строения стабильных нитроксильных радикалов.

Важными и интересным представляются результаты, полученные автором при сопоставлении квантово-химических расчетов изолированных молекул и молекул, находящихся в конденсированном состоянии. Введение соответствующих поправок позволяет получить лучшее согласие с экспериментом при энергетической привязки спектров к единой энергетической шкале потенциалов ионизации. Используя предложенные методы, диссертантом получено хорошее согласие при сопоставлении рентгеновских эмиссионных, рентгеновских фотоэлектронных и оптических фотоэлектронных спектров с данными литературы.

Представляются интересными являются сведения о корреляции спиновой плотности на ионе меди и величиной мультиплетного расщепления сателлитной структуры $Cu2p_{3/2}$ -спектров комплексов меди с нитроксильными лигандами. Необходимо также отметить, что структура РФЭС-спектров для многоядерного комплекса подобна структуре для одноядерных комплексов.

Основное содержание диссертации изложено в 4 статьях, опубликованных в журналах из Перечня рецензируемых изданий ВАК, и апробировано на нескольких конференциях. Текст в достаточной мере иллюстрирован, но не перегружен графическими материалами. Личный вклад соискателя определен ясно и недвусмысленно. Суть новых результатов диссертанта отражена в полной мере и позволяет со всей определенностью оценить как вклад автора в данную область науки, так и значимость и степень

оригинальности найденных им научных решений. Замечаний по структуре и оформлению автореферата не имею.

Диссертационная работа "Рентгеноэлектронное и рентгеноспектральное исследование электронного строения стабильных нитроксильных радикалов и комплексов переходных металлов на их основе" является научно-квалификационной работой, удовлетворяющей требованиям п. 9 "Положения о присуждении ученых степеней", предъявляемым к кандидатским диссертациям. Федоренко Анастасия Дмитриевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Бардин Вадим Викторович,

доктор химических наук,

ведущий научный сотрудник

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

 Бардин В. В.

1 декабря 2015 г

630090, Россия, г. Новосибирск,

пр. Академика Лаврентьева, д. 9,

тел. +7 (383) 330-94-32

e-mail: bardin@nioch.nsc.ru

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН

"Подпись Бардина В.В. заверяю"

Начальник ОК НИОХ СО РАН



Журкович Л. Р.