

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Кадиленко Евгения Михайловича по кандидатской диссертации «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами», представляемой на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Евгений Михайлович Кадиленко приступил к работе в нашей лаборатории студентом четвертого курса специалитета факультета естественных наук Новосибирского государственного университета. С самого начала основным направлением его исследований было теоретическое изучение свойств молекулярных систем с ярко выраженной статической корреляцией, таких как комплексы переходных металлов с органическими парамагнитными лигандами. Он очень быстро ознакомился со сложными многоконфигурационными методами расчета и приступил к изучению обменных взаимодействий в комплексах 3d-металлов с дирадикалами. Под моим руководством им была успешно защищена дипломная работа специалиста и продолжено обучение в очной аспирантуре ФЕН НГУ.

За время обучения в аспирантуре Евгений Михайлович существенно расширил свой научный кругозор, овладел релятивистскими методами расчета и различными современными подходами к анализу расчетных данных, такими, как квантовая теория атомов в молекуле и анализ натуральных орбиталей связи. Евгений Кадиленко успешно окончил аспирантуру, защитив на отлично выпускную научно-квалификационную работу, посвященную теоретическому исследованию магнитных свойств новых магнитоактивных материалов на основе анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами. Исследование магнитоактивных материалов актуально в связи с перспективами их использования в электронике и спинтронике, в том числе, в устройствах с высокой плотностью записи. Использование расчетных методов квантовой химии в совокупности с методами статистической физики позволяет объяснять на молекулярном уровне, моделировать и предсказывать макроскопические свойства магнитоактивных соединений.

За время выполнения диссертационной работы Евгением Михайловичем Кадиленко проделан большой объем квантовохимических расчетов высокого уровня, требующих высокой квалификации. Он проявил высокую компьютерную грамотность и эрудицию, способность ставить научные задачи и выбирать методы их решения, в том числе, осваивая самые современные подходы квантовой и компьютерной химии. Евгений самостоятельно спроектировал и разработал компьютерную программу для моделирования температурных зависимостей магнитной восприимчивости, адаптировав ее для параллельных вычислений и проведя последовательный учет симметрии и разреженности матриц состояний системы, что приводит к существенному повышению быстродействия вычислений.

Евгений является соавтором пяти научных статей в ведущих международных научных журналах (первого и второго квартилей), входящих в список ВАК, в которых изложены результаты данной диссертационной работы. Он лично провел все расчеты, обсуждаемые в работах, принимал активное участие в обсуждении и интерпретации результатов экспериментов и расчетов, формулировке выводов. Евгений Кадиленко также успешно представлял свои результаты на конференциях, всего он представил 5 докладов на международной и российской конференциях. Его успехи в научной работе отмечены личным грантом РФФИ для аспирантов и Стипендией Президента РФ для аспирантов и молодых ученых. Помимо научной работы, Евгений активно участвовал в педагогической деятельности: в течение трёх лет вел семинарские занятия на кафедре физической химии ФЕН НГУ.

Евгений Михайлович ответственно отнесся к написанию научно-квалификационной работы, квалифицированно проведя обзор литературы по сложным методам квантовой химии, используемым в диссертации, и в полном объеме, изложив полученные в ходе выполнения работы научные результаты. Все результаты, вошедшие в данную квалификационную работу, уже опубликованы. Написанная Евгением диссертационная работа будет несомненно полезна в будущем студентам и молодым сотрудникам, приступающим к работе или работающим в области молекулярного магнетизма.

Из всего перечисленного ясно, что Евгений Кадиленко зарекомендовал себя очень хорошо подготовленным, инициативным и самостоятельным научным сотрудником. Выполненный объем исследований свидетельствует также о его

трудолюбии и ответственном отношении к поставленным задачам. Считаю, что диссертационная работа Кадиленко Евгения Михайловича является цельным научным исследованием, соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.4.4 «Физическая химия», а сам Е. М. Кадиленко заслуживает присвоения ему степени кандидата химических наук.

Научный руководитель
Доктор химических наук (по специальности
1.4.4 – физическая химия), профессор
зав. лабораторией Квантовой химии и
компьютерного моделирования Федерального
государственного бюджетного учреждения
науки Институт химической кинетики и
горения Сибирского отделения
Российской академии наук
ул. Институтская 3, Новосибирск 630090,
Россия

Грицан Нина Павловна

Тел.: +7 (383) 333-3053

+7 913-789-8841

Эл. почта: gritsan@kinetics.nsc.ru

«20» февраля 2023 г.

Попись Н.В. Грицан *Н.В. Грицан*

Заместитель директора
ИХКГ СО РАН
научной работе, к.х.н.
Валиулин С.В.
02/2023