

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН по диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук **Кадиленко Евгения Михайловича** «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами» по специальности 1.4.4. Физическая химия

Комиссия диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора физико-математических наук **Козловой Светланы Геннадьевны** и членов комиссии — доктора химических наук **Булушевой Любовь Геннадьевны** и доктора химических наук, профессора РАН **Соколова Максима Наильевича** в соответствии с п. 31 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 г. № 1093 (в ред. от 07.06.2021 г.), на основании ознакомления с диссертацией на соискание ученой степени кандидата химических наук **Кадиленко Евгения Михайловича** и состоявшегося обсуждения приняла **следующее заключение:**

- 1) соискатель ученой степени кандидата химических наук соответствует требованиям п.п. 2-4 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.02.2013 г. № 842 в ред. от 20.03.2021 г.), необходимым для допуска его диссертации к защите;
- 2) диссертация на тему «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами» в полной мере соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия, по которой работа представлена к защите;
- 3) основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в 5 статьях, опубликованных Кадиленко Евгением Михайловичем в российских и международных журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, и индексируемых в международных информационно-библиографических системах Web of Science или Scopus, а также в тезисах 8 докладов на российских и международных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны;
- 4) оригинальность текста диссертации составляет 93 % от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, но без ссылок на соавторов, не выявлено. Текст диссертации, представленной в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на официальном сайте ИНХ СО РАН;
- 5) в диссертации разработана компьютерная программа для моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости широкого класса магнитоактивных соединений, в которой с целью ускорения вычислений использованы теория групп и разреженность матриц; для ряда солей анион-радикалов производных тиа- и селенадиазолов методами квантовой химии рассчитаны параметры всех значимых обменных взаимодействий и дано объяснение их магнитных свойств, в том числе переход соли производного тиадиазола с катионом бис(бензол)хрома(II) в состояние слабого ферромагнетизма, получено полуколичественное согласие результатов расчётов с экспериментально определенными температурами Кюри-Вейсса и перехода в ферромагнитное состояние;

проведены расчеты тензора СТВ с ядром ^{125}Te различными методами, учитывающими релятивистские эффекты, установлено, что только использование гамильтониана ZORA и орбиталей слейтеровского типа обеспечивает хорошее согласие результатов расчета с экспериментом; показано, что для соли анион-радикала производного теллурадиазола отсутствие в спектре ЭПР при 300 К сателлитов от расщепления на ^{125}Te не связано ни с малым значением изотропной константы СТВ ($a_{iso}^{calc.} \geq 14$ мТ), ни с заселением низколежащих возбужденных состояний;

предложена методика, которая приводит к наиболее точным расчетным параметрам спин-гамильтониана. Разработанная методика основана на использовании многоконфигурационных методов с последовательным увеличением размера активного пространства, учете динамической электронной корреляции и выборе модели для описания парамагнитных центров, при которой парамагнитные центры объединены в пары, а окружение представлено диамагнитными аналогами. Комиссия рекомендует:

1) принять к защите на диссертационном совете 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук **Кадиленко Евгения Михайловича** «Квантовохимические расчёты электронной структуры и моделирование магнитных свойств анион-радикальных солей и комплексов переходных металлов с парамагнитными лигандами»;

2) утвердить официальными оппонентами:

– **Трофимова Александра Борисовича**, доктора химических наук, профессора РАН, доцента, ведущего научного сотрудника научно-исследовательской части Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский государственный университет», г. Иркутск.

– **Юданова Илью Валерьевича**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской Академии наук», г. Новосибирск.

3) утвердить в качестве ведущей организации Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской Академии наук», г. Нижний Новгород.



д.ф.-м.н. Козлова Светлана Геннадьевна



д.х.н. Булушева Любовь Геннадьевна



д.х.н., профессор РАН Соколов Максим Наильевич

Подписи Козловой С.Г.,

Булусевой Л.Г., Соколова М.Н.

заверяю

и.о. ученого секретаря ИНХ СО РАН

к.х.н. Филатов Е.Ю.

21.03.2023

