

Отзыв на автореферат диссертации Федоренко Анастасии Дмитриевны

«Рентгеноэлектронное и рентгеноспектральное исследование электронного строения стабильных нитроксильных радикалов

и комплексов переходных металлов на их основе»,

представленную на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук по

специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертационная работа А.Д.Федоренко посвящена изучению связи природы магнитных взаимодействий в молекулярных системах с их электронной структурой. Актуальность и практическая значимость задачи подчеркивается наличием широкого фронта исследований по данной тематике. Работа представляет собой сочетание двух подходов – экспериментального, в котором использован целый набор спектральных методов, и теоретического, который опирается на расчеты методами квантовой химии.

А.Д.Федоренко исследовала РФЭС большой группы нитроксильных радикалов, а также ряда их диамагнитных аналогов, и комплексов двухвалентной меди с имидазол- и фенилзамещенными нитроксильными радикалами. Метод РФЭС применен также для исследования электронной структуры комплекса с нитроксильными радикалами с четырехядерным кластером меди. Методом рентгеновский эмиссионной спектроскопии изучено электронное строение парамагнитных и диамагнитных производных 3-имидазолина. Особый интерес представляет изучение межмолекулярных взаимодействий, а также взаимодействий между спинами на различных орбиталях.

Квантовохимическое исследование процессов, включающих переходы с основных орбиталей или на эти орбитали, связаны с определенными сложностями. Большинство квантовохимических программных комплексов рассчитаны на работу с процессами возбуждения и релаксации, связанными с пространством валентной области. Одним из немногих (а может быть и единственным программных комплексов), позволяющих проводить расчеты, затрагивающие электроны остова, является программный пакет АДФ, который и был использован диссертанткой в своей работе.

Тем не менее, при рассмотрении результатов расчетов имеется некоторая неясность. В большинстве спектров обнаружено наличие сателлитных структур. Автор уделяет большое внимание выяснению их природы. Для этого были выполнены расчеты

