

ОТЗЫВ

**на автореферат диссертационной работы Горбунова Дмитрия Евгеньевича
«Теоретический анализ электронной структуры и магнитных свойств органических
радикалов, дирадикалов и комплексов меди с ними»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества**

Поиск новых и исследование уже известных магнитных материалов является горячей точкой современной науки. Самые передовые исследования в этом направлении не обходятся без квантово-химических расчётов описывающих свойства молекулярных магнитных материалов, используемых как для анализа экспериментальных данных, полученных для вновь синтезированных соединений, так и для дизайна новых материалов. Проведение таких исследований для «классического» класса магнитоактивных материалов основанных на нитронил-нитроксильных и нитроксильных радикалах, а также выбор теоретических подходов, обеспечивающих необходимую точность расчётных параметров спин-гамильтонианов, описывающих свойства молекулярных магнитных материалов являются актуальной задачей.

Диссертационная работа Дмитрия Евгеньевича посвящена объяснению на молекулярном уровне магнитных свойств серии стабильных радикалов, дирадикалов и их комплексов с катионами Cu (II) на основе результатов высокоточных квантовохимических расчетов. Отдельное место в работе отведено установлению точности количественного предсказания свойств исследуемых магнитоактивных материалов с использованием общепринятого подхода неограниченной по спину DFT нарушенной симметрии и высокоуровневых многоконфигурационных расчётных методов. Полученные расчётные данные были применены для определения магнитных мотивов и анализа магнитных свойств новых магнитоактивных молекулярных поликристаллических материалов. Особо стоит отметить, использование автором собственной программы «july», позволяющей решать задачу нелинейной регрессии, задавая произвольный магнитный мотив образца.

В качестве замечания можно отметить, что в тексте автореферата имеется рисунок со структурными формулами радикалов R1-R3, хотя в основном обсуждается только R2. Когда же обсуждение переходит к радикалу R4 структуру его приходится представлять самостоятельно, т.к. адекватного изображения структурной формулы для него не приведено. Кроме того, в тексте часто фигурирует англоязычный термин «disjoint» для описания несвязанного дирадикала. Какова необходимость использования именно англоязычного термина?

Высказанные замечания не носят принципиального характера.

Результаты, отражённые в автореферате, безусловно, являются новыми, интересными и имеют важное фундаментальное и прикладное значение, а данное исследование вносит существенный вклад в развитие данной тематики, что подтверждается семью публикациями

в высокорейтинговых международных журналах и апробацией на ряде международных конференций.

Считаю, что диссертационная работа «*Теоретический анализ электронной структуры и магнитных свойств органических радикалов, дирадикалов и комплексов меди с ними*» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в ред. Постановлений Правительства РФ от 21.04.2016 № 335, от 02.08.2016 № 748, от 29.05.2017 № 650, от 28.08.2017 № 1024, от 01.10.2018 № 1168, от 20.03.2021 № 426), а ее автор, Горбунов Дмитрий Евгеньевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Конченко Сергей Николаевич

доктор химических наук

специальность 02.00.01 – *неорганическая химия* (химические науки)

главный научный сотрудник лабораторией химии полиядерных металл-органических соединений

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН)
630090, Россия, г.Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3
Тел. 8(383) 316 58 31,
Электронная почта: konch@niic.nsc.ru

10.12.2021

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись Конченко С.Н. заверяю

Ученый секретарь ИНХ СО РАН

д.х.н.

10.12.2021



О.А. Герасько