

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Дмитрия Евгеньевича Горбунова
«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

Изучение электронных и магнитных параметров новых функциональных материалов, создаваемых на основе органических радикалов и дирадикалов, особенно востребовано в микроэлектронике и вычислительной технике благодаря отличающему их от классических магнетиков набору нетривиальных свойств, которые полезны при создании стабильно работающих квантовых компьютеров. В этом отношении развитие теории для описания расчётных параметров спин-гамильтонианов для анализа экспериментальных данных и для дизайна новых материалов, описывающих свойства молекулярных магнитных материалов из первых принципов, несомненно, представляет собой актуальную задачу.

Для всех исследуемых радикальных и дирадикальных систем анализ сравнения результатов, полученных широко используемыми методами ограниченного по спину функционала плотности (DFT) и функционала плотности нарушенной симметрии (BS-DFT), с высокоточными, но ресурсозатратными методами многоконfigurационного взаимодействия, а также с результатами экспериментов, в случаях, если они проводились, демонстрирует надежность квантовохимического моделирования в работе Горбунова Д.Е. Показано, что для исследованных дирадикалов тензор расщепления в нулевом поле может быть определен с использованием ограниченного по спину метода DFT. В то же время параметр обменных взаимодействий J между радикальными фрагментами как радикалов, так и дирадикалов может рассчитываться в методе BS-DFT лишь с удовлетворительной точностью и только для радикальных фрагментов, не связанных сопряженными мостиками. В противном случае требуется использовать методы многоконfigurационного взаимодействия CASSCF. Результаты этого исследования представляют самостоятельную ценность, так как выбор и проверка точности теоретического подхода крайне важны не только для анализа экспериментальных данных, полученных для вновь синтезированных соединений, но и для дизайна новых материалов.

В диссертационной работе Горбунова Д.Е. с использованием высокоуровневых многоконfigurационных методов квантовой химии разработан комплекс алгоритмов и создано программное обеспечение,

позволяющее на основе заданного магнитного мотива моделировать зависимость магнитной восприимчивости материала от температуры. Применение этой программы в совокупности с полученными расчетными данными позволило установить, что магнитными мотивами серии новых тетразолил- и имидазолил-замещенных нитронил-нитроксильных радикалов являются ферромагнитно связанные цепочки со слабым антиферромагнитным взаимодействием между радикалами соседних цепей. Для радикалов смешанного типа с вердазильным и нитронил-нитроксильным фрагментами впервые был обнаружен одномерный магнитный мотив с цепочками ферромагнитно связанных дирадикалов с основным триплетным состоянием. Позитивную роль в достижении этих результатов, несомненно, сыграло тесное сотрудничество автора с коллегами-экспериментаторами, которое прослеживается в течение изложения всего автореферата. Это является еще одним достоинством данной диссертационной работы.

Решение задач нелинейной регрессии с заданным произвольным магнитным мотивом образца, состоящим из слабо взаимодействующих кластеров с достаточно большим набором парамагнитных центров, вывело работу Горбунова Д.Е. на качественно новый уровень исследований электронной структуры и магнитных свойств органических радикалов и дирадикалов. С помощью высокоточных квантовохимических расчетов исследованы магнитные свойства серии стабильных радикалов, дирадикалов и их комплексов с катионами Cu (II) , на основе которых определены магнитные мотивы и проведен анализ магнитных свойств новых магнитоактивных молекулярных поликристаллических материалов. Таким образом, исследования Горбунова Д.Е. представляют собой новый вклад в развитие молекулярного магнетизма.

В автореферате присутствует ряд опечаток и сложно воспринимаемых предложений, но это никак не влияет на общее хорошее впечатление о работе и высокую значимость полученных результатов.

Все существенные результаты работы опубликованы в авторитетных международных изданиях.

Диссертационная работа Горбунова Д.Е. представляет собой цельное научное исследование, выполненное на очень высоком профессиональном уровне, по актуальности и объему выполненных исследований, новизне полученных результатов и значимости сформулированных выводов соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук обозначенной в автореферате специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, и удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней.

Автор работы, Дмитрий Евгеньевич Горбунов, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по указанной специальности.

Ведущий научный сотрудник
лаборатории квантовохимического
моделирования молекулярных
систем,
канд. хим. наук

Зав. лабораторией квантовой химии,
доктор хим. наук, профессор

29.11.2021

Орел Владимир Борисович

ученая степень: кандидат химических наук, 02.00.04 – Физическая химия
ведущий научный сотрудник лаборатории квантовохимического
моделирования молекулярных систем

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Иркутский государственный университет»
664003, Иркутская область, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1
Тел. +7 395 252 1211, e-mail: orelv@isu.ru

Витковская Надежда Моисеевна

ученая степень: доктор химических наук, 02.00.04 – Физическая химия,
02.00.03 – Органическая химия

ученое звание: профессор

заведующий лабораторией квантовой химии

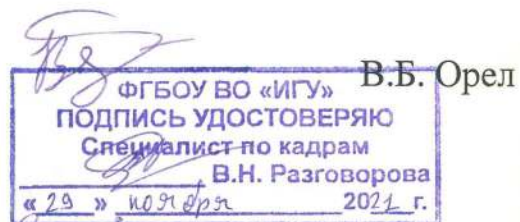
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Иркутский государственный университет»
664003, Иркутская область, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1
Тел. +7 395 252 1211, e-mail: vita@cc.isu.ru

Отзыв канд. хим. наук В.Б. Орла и доктора хим. наук,
профессора Н.М. Витковской заверяю.

Ученый секретарь федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «Иркутский
государственный университет»



/Н. Г. Кузьмина/



Handwritten signature of N.M. Vitkovskaya and a blue rectangular stamp. The stamp text reads: 'ФГБОУ ВО «ИГУ» Н.М. Витковская ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ Специалист по кадрам В.Н. Разговорова «29» ноября 2021 г.'"/>

