

ОТЗЫВ

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

Созданию новых материалов, включающих в себя парамагнитные центры и обладающих уникальными магнитными и электронными свойствами, уделяется особое внимание в последние десятилетия в первую очередь в связи с развитием микроэлектроники, разработкой и производством электронных компонентов, в том числе квантовых симуляторов и квантовых компьютеров. Такие особенности, как растворимость, пластичность и прозрачность, несвойственные для традиционных магнитных материалов на основе металлов, являются естественными дополнительными характеристиками молекулярных функциональных материалов. Учитывая многообразие магнитных мотивов, приводящих к тем или иным магнитным свойствам материала, установление реально действующих механизмов их проявления на атомарном уровне является весьма важной задачей, которая наиболее надежным образом может быть установлена в неэмпирических расчетах соответствующих свойств материалов на основе теоретических подходов, обеспечивающих требуемую точность.

В диссертационной работе Д. Е. Горбунова выполняются актуальные квантовохимические исследования новых магнитоактивных химических соединений (синтезированных в НИОХ и МТЦ СО РАН) как в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием неограниченного по спину варианта, так и с использованием ресурсоемких высокоуровневых многоконфигурационных методов CASSCF/NEVPT2 (т. е. в рамках теории с использованием волновой функции, или wave-function theory, WFT).

Основной целью этих расчетов было объяснение на молекулярном уровне магнитных свойств ряда стабильных радикалов, дирадикалов и их комплексов с катионами Cu(II), а также установление точности предсказания соответствующих магнитных свойств в рамках DFT и WFT подходов. Были выполнены расчеты электронной структуры, спектроскопии и синглет-триплетного расщепления для большого числа органических дирадикалов, как синтезированных, так и гипотетических. На основе этих расчетов были вычислены параметры спин-гамильтониана Гейзенберга-Дирака-ван-Флека для синтезированных кристаллов, в том числе для дирадикалов с катионом меди, установлены магнитные мотивы и смоделирована температурная зависимость магнитной восприимчивости их поликристаллических образцов. Выполнен анализ полученных результатов и оценена точность расчетов.

Научная новизна выполненных теоретических исследований заключается в выявлении ограничений применимости используемых в аналогичных расчётах параметров обменных взаимодействий, вычисленных методом BS-UB3LYP/def2-TZVP в рамках неограниченных по спину вариантов DFT с нарушенной симметрией.

Программа *july*, разработанная диссертантом для моделирования температурных зависимостей магнитной восприимчивости поликристаллов, может быть применена и для исследования магнитных свойств других магнитоактивных соединений, что определяет практическую значимость работы. С использованием данной программы удалось впервые продемонстрировать магнитный мотив в виде антиферромагнитно-взаимодействующих ферромагнитных цепочек дирадикалов с триплетным состоянием.


Достоверность представленных результатов обуславливается использованием таких методов расчета, которые уже подтвердили свою эффективность в аналогичных исследованиях других групп. Полученные данные хорошо обоснованы, должным образом согласуются друг с другом (с учетом того, что они получены в рамках разных подходов) и с

экспериментальными данными. Достоверность результатов также подтверждается семью публикациями в рецензируемых журналах высокого уровня и представлением полученных результатов на семи крупных международных и российских конференциях.

Существенных замечаний к автореферату нет, не считая мелких грамматических ошибок.

К безусловным достоинствам работы следует отнести согласованность и обоснованность результатов, полученных соискателем (что в первую очередь определяется применением высокоуровневых методов на основе WFT), а также практическую значимость результатов с учетом тесной кооперации с экспериментаторами, синтезирующими соответствующие магнитоактивные материалы.

Считаю, что диссертационная работа Д. Е. Горбунова представляет собой законченную научно-квалификационную работу, полученные результаты которой соответствуют специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества». Диссертация соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям (в ред. Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842). Таким образом, диссертационная работа Дмитрия Евгеньевича Горбунова «Теоретический анализ электронной структуры и магнитных свойств органических радикалов, дирадикалов и комплексов меди с ними», содержит решения важных и актуальных научных задач, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук, а ее автор вполне заслуживает присуждения искомой степени.

Титов Анатолий Владимирович, 
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник,
специальность 01.04.02 – теоретическая физика

руководитель Отделения перспективных разработок,
и.о. зав. лабораторией квантовой химии
Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский
институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» Национального
исследовательского центра «Курчатовский институт»
188300, РФ, г. Гатчина Ленинградской обл., мкр. Орлова роща, д. 1.
Тел./факс +7(81371)31055
Электронная почта: titov_av@pnpi.nrcki.ru

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

Подпись руки А. В. Титова удостоверяю
Ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
г. Гатчина
06.12.2021



/С.И. Воробьев/

