

## **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**

Работа Горбунова Д.Е. посвящена теоретическому исследованию с использованием современных методов квантовой химии нитронил-нитронильных и имино-нитроксильных дирадикалов и их комплексов с двухвалентной медью. Актуальность выполненной работы обусловлена необходимостью понимания сложных магнитных свойств молекулярных и полимерно-цепочечных комплексов на основе данного класса систем. Благодаря присущим ряду комплексов свойствам термо- и фотопереключения, изучаемый класс соединений привлекает значительное внимание синтетиков всего мира. Традиционно сильными позициями в синтезе подобных магнитоактивных соединений обладают лаборатории институтов МТЦ СО РАН и НИОХ СО РАН. Представляемая работа Дмитрия Евгеньевича является результатом его тесного сотрудничества с данными лабораториями, безусловно обладает новизной и высокой значимостью как для рассмотренного класса соединений, так и для области молекулярного магнетизма в целом. Работа наглядно демонстрирует, что современные методы квантовой химии применительно к изучаемому классу систем в руках грамотного специалиста могут давать исчерпывающую достоверную информацию, критически необходимую экспериментаторам для понимания последующих шагов проблемно-ориентированного синтеза. Опубликованные в результате данной работы статьи в высокорейтинговых журналах несут безусловную фундаментальную новизну и значимость и подчеркивают значимый вклад российских исследователей в понимание магнитных свойств таких сложных систем.

Автореферат диссертационной работы хорошо оформлен и хорошо читается. В тексте автореферата среди прочего кратко изложены результаты квантовохимических расчетов параметров спин-гамильтонианов, описывающих магнитные свойства нитронил-нитроксильных, имино-нитроксильных и вердазил-нитроксильных дирадикалов и их комплексов с двухвалентной медью: расчеты параметров расщепления в нулевом поле и внутри- и межмолекулярных обменных взаимодействий в кристаллах новых нитронил-нитроксильных и имино-нитроксильных дирадикалов.

Высокую ценность проделанной Горбуновым Д.Е. работы определяет систематическое сравнение параметров спинового гамильтониана исследуемых систем, получаемых из эксперимента и выполненных расчетов. Однако, несмотря на это, выводы, представленные в автореферате, сформулированы достаточно общим образом, без указания каких-либо

количественных величин. По этой причине выводы не в полной мере отражают высокий научный уровень проделанной работы и глубокое системное мышление автора работы. Высказанное замечание носит непринципиальный характер и не меняет хорошего впечатления от проделанной работы.

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.

Вебер Сергей Леонидович  
кандидат физико-математических наук  
специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества  
старший научный сотрудник лаборатории ЭПР-спектроскопии  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт «Международный томографический центр»  
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН)  
630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3а  
Тел. 8(383) 333 14 60,  
Электронная почта: sergey.veber@tomo.nsc.ru  
07.12.2021

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

Подпись Вебера С.Л. заверяю

Ученый секретарь МТЦ СО РАН

к.х.н.

Дата 07.12.2021



Л.В. Яньшолё