

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы **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

Диссертационная работа Д. Е. Горбунова, посвященная квантово-химическому анализу структуры и свойств органических магнетиков, выполнена на высоком научном уровне. Она является фундаментальной, высоко актуальной, и имеет перспективы практического использования при конструировании и синтезе функциональных молекулярных материалов. К особым достоинствам работы относятся следующие впервые полученные результаты:

- Создание оригинальной программы моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T) \times T$, применимой к магнитным мотивам любой сложности в больших ансамблях парамагнитных центров.
- Надежный расчет обменных взаимодействий и установление магнитных мотивов в кристаллах серии тетразолил- / имидазолил-замещенных нитронил-нитроксидов.
- Анализ электронной структуры, расчет синглет-триплетных расщеплений, определение магнитных мотивов и моделирование температурных зависимостей магнитной восприимчивости большой группы дирадикалов – нитроксидов, иминонитроксидов, нитронил-нитроксидов и гибридных вердазил-нитронил-нитроксидов. Для последних обнаружен одномерный магнитный мотив с цепочками ферромагнитно-связанных триплетных дирадикалов.
- Анализ всего массива теоретических данных со сравнением расчетных и модельных значений параметров спин-гамильтониана, позволившим, в частности, установить границы применимости методов DFT и необходимость за ее пределами неэмпирических расчетов, например, CASSCF с большим активным пространством и учетом динамической электронной корреляции.

Надежность результатов и обоснованность выводов работы не вызывают сомнений.

В целом, диссертационная работа Д. Е. Горбунова отвечает всем релевантным критериям научной новизны, оригинальности и значимости, а также современным стандартам научного качества. Недостатков, заслуживающих публичного обсуждения, ее автореферат не содержит.

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. Она полностью 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). Ее автор – **Дмитрий Евгеньевич Горбунов**, безусловно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Андрей Викторович Зибарев

доктор химических наук

специальность 1.4.3 – органическая химия

заведующий лабораторией гетероциклических соединений

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Новосибирский институт органической химии

Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Лаврентьева, д. 9

Тел. 8 (383) 330 9664

Электронная почта: zibarev@nioch.nsc.ru

23.11.2021

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

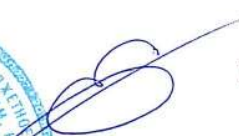
«Подпись А. В. Зибарева заверяю»

Заместитель директора НИОХ СО РАН

к.х.н.

23.11.2021



 Е. В. Суслов