

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Горбунова Дмитрия Евгеньевича «Теоретический анализ электронной структуры и магнитных свойств органических радикалов, дирадикалов и комплексов меди с ними», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Тематика диссертационного исследования Горбунова Д.Е. относится к **актуальному** направлению современной химической физики и физической химии, связанному с теоретическим изучением магнитных взаимодействий в системах на основе органических радикалов и их комплексов с металлами. Такие системы могут входить в состав новых молекулярных материалов, обладающих целым набором практически важных магнитных свойств, – органических ферромагнетиков, магнитных жидкостей, спиновых стекол и др. В качестве объектов были выбраны неисследованные до этого нитронил- и иминонитроксильные радикалы и дирадикалы, вердазил-нитронил-нитроксильные дирадикалы, а также комплексы гексафторацетилацетоната меди с нитронил- и иминонитроксильными дирадикалами, содержащими азуленовый мостик. Следует отметить широкий круг исследованных автором радикальных соединений. В работе были использованы современные методы квантовой химии, включающие как сравнительно низкочастотные расчеты в рамках DFT, так и многоконфигурационные вычисления высокого уровня (CASSCF/NEVPT2).

Автором рассчитаны параметры обменных взаимодействий и установлены магнитные мотивы в кристаллах новых радикалов и дирадикалов. В частности, для радикалов смешанного типа с вердазильным и нитронил-нитроксильным фрагментами обнаружен одномерный магнитный мотив с цепочками ферромагнитно связанных триплетных дирадикалов. Были получены интересные результаты, показавшие, что теория функционала плотности с удовлетворительной точностью описывает магнитные взаимодействия между радикалами и радикальными фрагментами дирадикалов, не связанных сопряженными мостиками. В то же время оказалось, что метод нарушенной симметрии дает некорректное описание дирадикалов с сопряженными мостиковыми группами. Разработана полезная программа july для моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости с помощью нелинейной аппроксимации экспериментальных магнитных данных. Все это доказывает высокий уровень **новизны**, а также **научной и практической значимости** полученных результатов, что подтверждается публикациями в авторитетных

международных журналах, включая *Angew. Chem. Int. Ed.* и *Chem. Eur. J.* В качестве небольшого замечания, не влияющего на общую высокую оценку работы, можно отметить лишь слишком общее определение объектов исследования в названии диссертации.

В целом, анализ материалов автореферата позволяет заключить, что Горбуновым Д.Е. на высоком теоретическом уровне выполнено завершённое научное исследование в рамках актуального направления современной химической физики. По поставленным задачам, характеру их решения и научной новизне полученных результатов диссертационная работа «Теоретический анализ электронной структуры и магнитных свойств органических радикалов, дирадикалов и комплексов меди с ними» полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842; в текущей редакции), а ее автор, Горбунов Д.Е., заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией строения металлоорганических и координационных соединений  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Института металлоорганической химии  
им. Г.А. Разуваева Российской академии наук,  
доктор химических наук  
по специальности 1.4.4. (02.00.04) - физическая химия  
Кетков Сергей Юлиевич



«30» ноября 2021 г.

Адрес 603950, г. Нижний Новгород, бокс 445, ул. Тропинина, 49,  
тел. +7 (831) 4627709, E-mail: sketkov@iomc.ras.ru

Подпись С.Ю. Кеткова заверяю

Ученый секретарь ИМХ РАН  
кандидат химических наук



К.Г. Шальнова