

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации В. В. Новикова
«Молекулярный магнетизм клеточных комплексов кобальта»
на соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 02.00.04 — физическая химия

Работа, представленная Валентином Владимировичем Новиковым на соискание ученой степени доктора химических наук, посвящена исследованию магнитных эффектов в комплексах переходных металлов с органическими лигандами. Интерес к этой тематике обусловлен разработкой молекулярных магнитов и устройств на их основе, потенциально применимых для хранения информации, элементов квантовых компьютеров и симуляторов, сенсоров, транзисторов и т.п., как справедливо отмечает автор в вступительной части автореферата. Следствием этой актуальности является весьма активная разработка области, в которой работают десятки научных групп, исследующих (бесконечные) сочетания ионов металлов и лигандов. Обсуждаемая работа лежит в русле этого поиска и на его передовом крае, что легко доказывается количеством и качеством составивших ее публикаций. Представляется, однако, что ей присущи яркие отличительные черты, выводящие ее за рамки рутинного исследования и позволяющие говорить о создании нового направления в методическом и идейном смысле. Позволю себе остановиться именно на этих чертах, предоставив оценку химических результатов более сведущим экспертам.

Во-первых, работа демонстрирует виртуозное владение методами исследования магнитных свойств и глубокое понимание их физических принципов и ограничений. Предложенная автором методика оценки расщепления в нулевом поле и эффективного барьера спинового перехода по температурной зависимости анизотропии диамагнитной восприимчивости из данных ЯМР не только оригинальна и изящна, но и практически полезна. Именно благодаря ей автор смог отойти от ресурсоемкого скрининга широких классов комплексов и сосредоточиться на детальном исследовании наиболее интересных для целей работы систем. Замечу, что интерпретация температурных зависимостей не является феноменологической, а построена на вполне четких теоретических концепциях и методах. Обсуждения исследований различных комплексов дают многочисленные примеры виртуозного применения метода ЭПР, четкого понимания его ограничений и элегантных приемов их обхода.

Во-вторых, работа отличается стремлением дать максимально полное описание исследуемой системы, с применением различных экспериментальных и теоретических подходов, изучением вещества в различных агрегатных состояниях и температурных режимах. Для автора работы нет мелочей. Именно благодаря такому комплексному подходу были получены наиболее физически значимые результаты работы: отрицательный кооперативный эффект в комплексе $\text{Co}(\text{GmCl}_2)_3(\text{VCH}_3)_2$; нетипичный характер ян-теллеровских искажений в тригонально-пирамидальных комплексах с жестким лигандным каркасом; значительный вклад запрещенного механизма туннельной релаксации (квантового туннелирования намагниченности) в комплексах кобальта со спиновыми лигандами, влияние полиморфной структуры на характер спиновой динамики и ряд других. Нужно особенно подчеркнуть, что в наиболее интересных ситуациях различные вклады в энергетику комплекса – спин-орбитальное расщепление, ян-теллеровское искажение, барьер спинового перехода, межмолекулярные взаимодействия внутри системы и в материале – имеют близкий порядок величины, 50 – 200 К. Обоснованное разделение и характеристика этих вкладов стали возможными именно благодаря применению комплексного подхода.

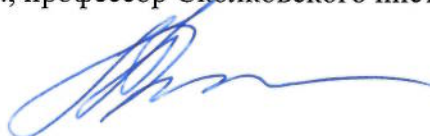
В-третьих, работа отличается цельностью и здоровой прагматичностью. Используемый автором расхожий термин «направленный дизайн» в ее контексте полностью оправдан. Сочетание четкого понимания роли различных структурных, физических и химических эффектов в определении магнитных свойств и характера спиновой динамики с применением оригинальных экспериментальных методик позволили автору целенаправленно двигаться к решению поставленной задачи – «поиску новых соединений с большими временами магнитной релаксации и переключаемыми магнитными свойствами». Было бы натяжкой говорить о том, что эта задача успешно решена, однако общие выводы работы (1, 2 и 6) безусловно составляют фундаментально важные стадии искомого решения.

Изложение работы в автореферате заслуживает отдельной похвалы – четко описана методическая часть работы, отобраны примеры, иллюстрирующие наиболее интересные и значимые результаты, и сохранен «сюжет» направленного дизайна. Возникшие мелкие замечания относятся к разряду не снижающих достоинства и высокую оценку работы.

1. Во введении справедливо указано, что скорость магнитной релаксации является ключевым для практических применений свойством молекулярного магнита. Уделяя ему большое внимание, автор не приводит количественных величин характерных времен релаксации. Без них понятия быстрой или медленной релаксации носят оценочный характер.
2. Опираясь на понятия спинового и орбитального момента, автор избегает обсуждения спин-орбитального взаимодействия. Было бы полезно кратко охарактеризовать связывание моментов в случае иона кобальта.

По моему мнению, работа, представленная Валентином Владимировичем Новиковым на соискание ученой степени доктора химических наук, является цельным фундаментальным научным исследованием по выбранной специальности, подчиненным четким практическим целям и задачам. Высочайший уровень его методологии позволил получить ряд новых фундаментальных результатов, а строгая теоретическая интерпретация – сформировать новое направление на пути решения практических задач. Результаты работы опубликованы в ведущих международных журналах и апробированы на престижных конференциях по тематике. Считаю, что эта работа безусловно удовлетворяет всем сущностным и формальным критериям докторской диссертации, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени.

Д.ф.-м.н., профессор Сколковского института науки и технологий



Бучаченко Алексей Анатольевич
a.buchachenko@skoltech.ru +7 (915) 318 51 81

Сколковский институт науки и технологий
Территория Инновационного Центра “Сколково”, улица Нобеля, д. 3
Москва 143026
Россия
Телефон: +7 (495) 280 14 81
E-mail: inbox@skoltech.ru

Руководитель отдела
Кадрового администрирования
Бучаченко А.И.

