

ОТЗЫВ

Официального оппонента доктора физико-математических наук М. В. Федина
на диссертационную работу **Штефанец Валерии Павловны** на тему

**«ВЛИЯНИЕ КООРДИНАЦИОННОГО ОКРУЖЕНИЯ ИОНОВ
4f-МЕТАЛЛОВ НА ПРОЦЕССЫ МЕДЛЕННОЙ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ
В СОЛЕВЫХ И НЕЙТРАЛЬНЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ
β-ДИКЕТОНАТАХ И КОМПОЗИТАХ НА ИХ ОСНОВЕ»**

на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности

1.4.4 – Физическая химия

Актуальность темы научно-квалификационной работы Штефанец В. П. связана с развитием методов дизайна магнитоактивных соединений, проявляющих свойства молекулярных магнитов и перспективных для применений в задачах спинтроники, сверхплотного хранения данных и т.д. Установление закономерностей влияния координационного окружения ионов 4f-металлов на процессы медленной магнитной релаксации в солевых и нейтральных редкоземельных β-дикетонатах и композитах на их основе является актуальным для развития данной области науки.

Целью диссертационной работы является исследование роли геометрии координационного окружения ионов металлов на процессы магнитной релаксации в солевых и нейтральных редкоземельных β-дикетонатах и соответствующих композитах. Для достижения поставленной цели автор ставит и решает ряд четко сформулированных задач.

Научная новизна исследования и полученных результатов обусловлена синтезом и детальным исследованием магнитных свойств ряда новых соединений – мономолекулярных магнитов на основе редкоземельных β-дикетонатов – и установлением корреляций между их структурой и магнитными свойствами, включая зависимости статической магнитной восприимчивости и релаксации от температуры.

Теоретическая и практическая значимость работы связаны с расширением знаний о том, как ряд структурных факторов, включая геометрию координационного полиэдра, связан с наблюдаемыми свойствами молекулярного магнетизма в семействе гексафторацетилацетонатов редкоземельных металлов.

Содержание диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, литературного обзора, экспериментальной главы, результативной главы и выводов, а также соответствующих приложений.

Во введении (глава 1) автор обосновывает актуальность проблемы, ставит основные цели и задачи исследования, обсуждает научную новизну и значимость работы.

В литературном обзоре (глава 2) приводится обзор исследований, связанных с разработкой и изучением мономолекулярных магнетиков различными экспериментальными методами.

В экспериментальной части (глава 3) описаны использованные синтетические методы,

оборудование, примененное для изучения структурных и магнитных свойств синтезированных в данной работе соединений, основные методологические подходы.

Глава 4 посвящена описанию основных полученных результатов и их обсуждению. Детально обсуждены структурные свойства синтезированных мономолекулярных магнетиков по данным рентгеноструктурного анализа, приведены данные магнитометрии для всех комплексов, изучены механизмы магнитной релаксации, а также свойства фотоактивного комплекса и синтезированного полимерного композита.

Наконец, автор формулирует основные выводы исследования.

Работа включает список цитируемой литературы, содержащий 198 источников.

Степень обоснованности и достоверность научных положений и выводов.

Достоверность представленных выводов и результатов не вызывает сомнений ввиду использования различных комплементарных методов исследования и детального анализа всех полученных данных. Подтверждением достоверности также является публикация результатов диссертации в профильных рецензируемых международных журналах.

По работе имеются следующие замечания:

- 1) На стр. 10 упомянуто, что сохранение намагниченности в отсутствие внешнего магнитного поля и открытый гистерезис в мономолекулярных магнитах наблюдаются «только при очень низких температурах». Однако на настоящий момент преодолен принципиальный температурный рубеж в 77 К (температура кипения жидкого азота), что драматически продвигает потенциальные применения мономолекулярных магнитов; показана их функциональность при 80 К. Автору данные работы известны, и они цитируются далее по тексту диссертации. По всей видимости, в данном отрывке имеет место неточность формулировки.
- 2) В разделе 2.6 на стр. 38-39 имеются 2 абзаца общего вводного содержания про суть мономолекулярного магнетизма (выше и ниже рис.30), повторяющие по смыслу написанное ранее в разделе 2.1.
- 3) На стр.69, рис.51, приводятся данные АС магнитометрии во внешнем поле 600 Э. Выше выбор такого значения поля обосновывается наилучшим сигналом мнимой части магнитной восприимчивости именно при 600 Э, хотя был просканирован широкий диапазон полей от 0 до 4 кЭ. Поскольку приложенное внешнее поле подавляет процессы квантового туннелирования путем снятия вырождения уровней, остается неясным, почему именно 600 Э является оптимальным, и в чем причина ухудшения сигнала в более высоких полях? Было бы полезно кратко обсудить эти аспекты в диссертации. Тот же общий вопрос возникает и для других соединений далее по тексту.
- 4) На стр. 77 в абзаце над рис.61 указано, что температурно-независимый парамагнетизм может быть результатом «... неравенства в электронной конфигурации и/или свойствах электротранспорта». Данная формулировка представляется неясной (неравенство чего?), а также неточной в части электронного транспорта.
- 5) Данные магнитной восприимчивости в низкотемпературной области, представленные на рис.64а, проинтерпретированы с привлечением обменного взаимодействия в биядерном

комплексе. Возможно ли такое уменьшение магнитной восприимчивости альтернативно описать эффектами анизотропии (расщепления в нулевом поле), что не противоречит результатам рис.64б?

6) На стр.81 ниже рис.65 указано, что смещение максимума зависимостей АС магнитометрии от температуры «указывает на отсутствие процесса квантового туннелирования». Данная формулировка неточна; корректнее говорить об относительных вкладах процессов.

7) Данные ИК спектроскопии, приведенные на рис.69, непонятны без пояснения в тексте и на самом рисунке – визуально трудно различить спектры полимерного композита с включением и без включения молекулярного магнетика.

8) На стр.86 над рис.70 дважды повторяется по смыслу предложение об однородности распределения мономолекулярных магнитов в полимере.

9) На стр.92 приведены данные о заметном снижении величины эффективного барьера для мономолекулярного магнетика в полимерном материале по сравнению с исходным веществом. Было бы полезно обсудить возможные причины такого эффекта для конкретного комплекса.

10) В работе содержится некоторое количество опечаток и грамматических неточностей.

Сделанные замечания носят рекомендательный характер и не умаляют общего положительного впечатления от рассматриваемой диссертационной работы как от законченной работы, выполненной на высоком современном научно-техническом уровне.

Основные положения диссертационной работы отражены в 4 опубликованных работах в профильных журналах.

Автореферат диссертации достаточно полно отражает основное содержание диссертационной работы и достигнутые результаты.

Диссертационная работа Штефанец Валерии Павловны на тему «Влияние координационного окружения ионов 4f-металлов на процессы медленной магнитной релаксации в солевых и нейтральных редкоземельных β -дикетонатах и композитах на их основе» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности «1.4.4. Физическая химия» представляет собой завершенную научно-исследовательскую работу, выполненную на высоком научном уровне, в которой с помощью методов РСА и магнитометрии исследован ряд комплексов редкоземельных металлов, проявляющих мономолекулярный магнетизм, установлены корреляции структура-свойство и механизмы магнитной релаксации.

Научные положения и выводы, сформулированные автором, не вызывают сомнений. Результаты диссертационной работы оригинальны, достоверны и отличаются научной новизной и практической значимостью. Результаты отражены в публикациях и апробированы на профильных конференциях.

Диссертационная работа в полной мере соответствует паспорту специальности 1.4.4 – Физическая химия, в том числе диссертация соответствует п. 1 “Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик”, п. 5 “Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных

соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях” паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия.

Считаю, что диссертационная работа «Влияние координационного окружения ионов 4f-металлов на процессы медленной магнитной релаксации в солевых и нейтральных редкоземельных β -дикетонатах и композитах на их основе» соответствует всем критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Штефанец Валерия Павловна, заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Официальный оппонент

Федин Матвей Владимирович

Доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН,

Специальность 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Директор, главный научный сотрудник МТЦ СО РАН

М.В. Федин

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук.

630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3а. Тел.: +7 383 333-31-52. Факс: +7 383 333-13-99, электронная почта: mfedin@tomo.nsc.ru, itc@tomo.nsc.ru

14 ноября 2025 г.

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

Подпись директора, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Федина М.В. заверяю

Ученый секретарь МТЦ СО РАН, к.х.н.

Л.В. Янышолё

