

ОТЗЫВ

на выпускную дипломную работу Бондарева Павла Дмитриевича
«Магнитные свойства комплексов железа с фуллереном»

Объектом исследования выпускной дипломной работы являлись новые интересные с химической и с физической точки зрения соединения, а именно эндокомплексы фуллерена с кластерами железа различной мультиплетности, рассмотрены синглетные и триплетные спиновые состояния.

Чтобы изучить на молекулярном уровне процессы взаимодействия атомов железа с молекулами фуллерена, необходимо хорошо ориентироваться в методах квантовой химии, а для этого изучить математический аппарат квантовой механики. С этой задачей П.Д.Бондарев справился самостоятельно. Представленная работа содержит литературный обзор в котором подробно описаны методы, используемые в программных пакетах квантовой химии. В результате проведенных расчетов получены интересные предварительные результаты, разработаны методики, которые могут способствовать дальнейшему развитию моделирования наноструктур с заданными магнитными свойствами.

За время работы Бондарев Павел Дмитриевич проявил себя как активный и любознательный исследователь, владеющий современной вычислительной техникой. Исследования эндокомплексов молекулы фуллерена с атомами железа в полости, анализ равновесных структур и сравнение их магнитных свойств со свободными кластерами железа различной мультиплетности проведены корректно, результаты сопоставлены с имеющимися в литературе данными. Работа с литературой требовала хорошего знания английского языка и с этим дипломант успешно справился. Прогнозирование строения и свойств наноструктур методами компьютерного моделирования может быть продолжено в дальнейшей работе. Тема является актуальной и с практической точки зрения, так как магнитные свойства этих соединений могут быть использованы в медицине в магнитной томографии а также для разрушения раковых опухолей.

Проверка на плагиат выявила 96% оригинального текста.

Дипломная работа П.Д.Бондарева заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель
к.х.н., доцент



Бедрина М.Е.