

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Собалева Сергея Александровича «Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных кристаллов», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа посвящена актуальной проблеме – исследованию взаимосвязи между характеристиками химической связи, которые могут быть получены из *ab initio* расчета, и упругими свойствами материала, в том числе уникальными, такими, как отрицательная сжимаемость. В работе рассматриваются и выявляются количественные критерии этой взаимосвязи, дескрипторы, что является особо полезным для разработки новых материалов с требуемыми свойствами.

По сути, в работе предложен новый подход к моделированию соединений с требуемыми упругими свойствами на уровне *ab initio*. При разработке этого подхода в работе исследованы ряды соединений – дигалогениды  $\text{Hal}_2$ , гексагалогенбензолы  $\text{C}_6\text{Hal}_6$ , тринитрогалогенметаны,  $\text{Hal}-\text{C}(\text{NO}_2)_3$  ( $\text{Hal} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ), формиаты металлов  $(\text{HCOO})_n\text{M}^{n+}$  ( $\text{M}^{n+} = \text{Na}^+, \text{Ca}^{2+}, \text{Cd}^{2+}$ ), и различные типы химических связей. Таким образом, показана валидность предложенного подхода.

Можно отметить, что расчеты выполнены с гибридными DFT функционалами, учитывающими вклад нелокального обмена в формализме Хартри-Фока. Гибридные функционалы являются наиболее адекватными, но требуют больших затрат машинных ресурсов и достаточно редко используются. Использование гибридных функционалов говорит о хорошем качестве расчетов. Использование в работе хорошо опробованных гибридных функционалов позволяет полагать, что распределение электронной плотности, её производные, необходимые для определения квантового электронного давления, были адекватно рассчитаны в работе.

В работе впервые выявлены структурные факторы, отвечающие за отрицательную сжимаемость формиатов металлов, впервые показано, что функция квантового электронного давления может быть использована для прогноза механических свойств кристаллов. Результаты работы непосредственно способствуют разработке новых материалов с требуемыми упругими свойствами.

Результаты работы, безусловно, обладают новизной и являются актуальными. Автор работы показал высокий уровень квалификации в области *ab initio* расчетов, достижение такого уровня требует ряда лет интенсивной работы.

Результаты диссертационной работы опубликованы в 4-х статьях в высокорейтинговых рецензируемых журналах, а также представлены в большом количестве докладов на международных и всероссийских конференциях.

Результаты работы хорошо представлены и проиллюстрированы, например, построены карты распределения квантового электронного давления (рис. 11 в автореферате), полученные на основе расчетов в программе CRYSTAL.

В качестве замечаний к тексту автореферата могу высказать следующее: в тексте автореферата (описание главы 2) слишком сжато изложены подробности ab initio расчетов – не упоминается точность расчета самосогласованного поля, двухэлектронных интегралов, частота сетки Монкхорста-Пака и т.п., что представляет интерес для специалистов в этой области. Надеюсь, что в тексте диссертации эта информация приведена более подробно.

Сформулированные к автореферату замечания не снижают высокой оценки работы.

Считаю, что диссертационная работа «*Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных кристаллов*» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (ред. от 25.10.2023), а ее автор, *Собалев Сергей Александрович*, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Чернышев Владимир Артурович

кандидат физико-математических наук, доцент,  
специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния,  
доцент кафедры физики конденсированного состояния  
и наноразмерных систем,

Институт естественных наук и математики,

ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет

имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

Тел.: +7 (343) 3754444

e-mail: vladimir.chernyshev@urfu.ru

Дата: 29 ноября 2023 г.

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

Подпись к.ф.-м.н., доцента ФГАОУ ВО «Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» Чернышева В.А. заверяю.

ведущий документовед  
  
/С.Н. Шуклич