

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

Для сегодняшнего состояния химической науки характерно то, что во всё большей степени при изучении различных физико-химических свойств веществ исследователи уходят от эксперимента, заменяя его квантово-химическими расчетами, приносящими сопоставимую по точности с экспериментом информацию об объекте исследования и позволяющими дать детальное описание его свойств в терминах геометрического и электронного строения, внутримолекулярной ядерной динамики, природы химической связи и т.д.

Диссертационная работа Собалева С.А. является характерным примером такого подхода и направлена на квантово-химическое моделирование механических свойств ряда кристаллов с органическими фрагментами. Актуальность и практическая значимость работы не вызывают сомнения, поскольку данные по упругим характеристикам молекулярных кристаллов в связи с их пространственной организацией, природой и топологией химической связи, структурной динамикой при механическом воздействии являются информацией принципиальной важности при поиске путей целенаправленной модификации химического состава и структуры кристаллов с целью придания им заданных, в том числе и механических, свойств.

В качестве особенно интересных среди конкретных результатов диссертационной работы следует отметить выполненный в терминах квантового электронного давления анализ сжимаемости галогенных связей в сравнении с ван-дер-ваальсовым взаимодействием и сделанные заключения об их вкладе в упругие свойства кристаллов, предсказание анизотропии сжимаемости и ее динамика с ростом внешнего гидростатического сжатия, ранжирование типов химических связей в формиатах металлов в зависимости от величины относительного изменения квантового электронного давления при гидростатическом сжатии кристалла.

Сочетание "функционал/базис» в проведенных DFT расчетах обеспечивает теоретический уровень, необходимый для адекватного описания геометрического и электронного строения изученных систем с данным набором атомов и размерностью, что свидетельствует в пользу достоверности

результатов работы. Дополнительно достоверность научных результатов диссертации подтверждается тем, что они опубликованы в авторитетных научных журналах и прошли апробацию на ряде представительных научных форумов.

Считаю, что диссертационная работа Собалева С.А. «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.

Гиричев Георгий Васильевич
доктор химических наук, профессор
специальность 02.00.04 – физическая химия,
заведующий кафедрой физики

Подпись

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

Ивановский государственный химико-технологический университет
153000, Россия, г. Иваново, просп. Шереметевский, 7
Тел. +7 (4932) 35-98-74,
Электронная почта: girichev@isuct.ru
06.12.2023

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

Подпись Гиричева Г.В. заверяю

Ученый секретарь Ученого совета Ивановского государственного химико-технологического университета

06.12.2023



А.А. Хомякова