

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 Собалева посвящена одной из наиболее актуальных проблем современной физической химии твердых веществ – поиску взаимосвязи между их макроскопическими характеристиками, определяющими, в частности, механические свойства, и микроскопическими изменениями в образцах при внешних воздействиях или в ходе твердофазных превращений, прежде всего, изменениями электронного строения не только собственно валентных химических связей, но и межмолекулярных, нековалентных взаимодействий. В данном направлении в мире начинает работать все больше групп, однако для нашей страны исследования остаются редкими, возможно, потому, что требуют очень высокой квалификации в области квантовой кристаллографии, научной школы. Такая школа есть в Челябинске и соискатель является ее молодым, но уже вполне сложившимся представителем.

Значение, актуальность, возможные применения результатов диссертационной работы хорошо отражены в Автореферате, я могу подписаться под тем, что написано соискателем. Цель работы – установить взаимосвязь между электронными характеристиками химических связей и механическими свойствами кристаллов с органическими компонентами, изучаемыми при моделировании их гидростатического сжатия, достигнута применительно к широкому кругу объектов. При этом выбор объектов представляется удачным, так как представлены как основные виды нековалентных взаимодействий, так и объекты, вызывающие сегодня огромный интерес в качестве перспективных материалов. Например, огромен интерес к формиатам как структурной единице многих металл-органических каркасных пьезо- и сегнетоэлектриков, катализаторов, для которых характерны отрицательное термическое расширение и отрицательная линейная и двумерная сжимаемость.

Результаты работы прошли хорошую апробацию. Они опубликованы в четырех статьях в профильных рецензируемых международных журналах, докладывались на многих международных и конференциях.

Как экспериментатор, на протяжении уже тридцати лет изучающий влияние давления на органические и координационные соединения дифракционными и спектроскопическими методами, я особенно хорошо осознаю, какую дополнительную информацию, недоступную экспериментаторам, могут дать теоретические расчеты, подобные проводимым соискателем. Только расчеты позволяют понять, как именно связаны изменения координат атомов, получаемые в экспериментах, с изменениями электронного континуума при деформации кристаллов. В то же время, опять же, как экспериментатор, я не могу быть в полной мере удовлетворена, когда вижу в Автореферате только расчетные данные, представленные в виде графиков и рисунков, без сравнения с теми данными, которые получены из экспериментов. Хотелось бы видеть такое сравнение данных. Хотелось бы также, чтобы и в выводах из работы сравнению данных, доступных ранее из эксперимента, и полученных в результате проведенных расчетов, было уделено больше внимания. Сейчас только в Выводе 3 экспериментальные данные как-то упоминаются. Понимаю ограниченность места в Автореферате и надеюсь, что ответ

на мое пожелание сравнения результатов и выводов из теоретической работы соискателя с тем, что было доступно ранее экспериментаторам, позволит еще более выпукло показать достоинства и научную значимость данной 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.

Болдырева Елена Владимировна
доктор химических наук, профессор
специальность 02.00.21 – химия твердого тела,
ведущий научный сотрудник Отдела физико-химических методов исследования
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук (ИК СО РАН)
630090, Россия, г.Новосибирск, пр. Лаврентьева, 5
Тел. +7 (913) 931 39 25,
Электронная почта: eboldyreva@catalysis.ru
29.11.2023

Болдырева

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

Подпись Болдыревой Е.В. заверяю

Ученый секретарь Института катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук (ИК СО РАН)

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ И
К.Х.Н. Ю.В. ДУБИ



29.11.2023