

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **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

Рецензируемая научно-квалификационная работа Собалева Сергея Александровича **«Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных кристаллов»** относится к актуальному направлению исследований, предсказательному описанию механического поведения новых синтезируемых молекулярных кристаллов, особенностей образования у них нековалентных связей, поиску различных количественных дескрипторов, достоверно отражающих их свойства при различных деформационных нагрузках и т.д. Она носит фундаментальный характер, поскольку оценка электронных параметров, исходя из электронного строения единичных молекул и их нековалентных связей в кристаллах, является научной основой для понимания зависимости механических свойств материалов от свойств нековалентных взаимодействий. Работа имеет и практическую направленность в плане создания функциональных материалов с заранее смоделированными механическими свойствами, например, изучение природы отрицательной линейной сжимаемости, что важно при разработке датчиков давления протекторов, приводов и пр.

В этом направлении диссертантом поставлена и цель исследований, которая определила задачи, требующие решения в рамках данной научно-квалификационной работы. Им было поставлено и успешно решено пять задач, результатом решения которых является получение новых значимых результатов:

Для серии кристаллов с галогенными связями и для $(\text{HCOO})_n\text{M}^{n-}$ проведена теоретическая оценка и выполнен прогноз механического поведения таких кристаллов, опираясь только на квантово-химическое моделирование процесса их гидростатического сжатия.

Впервые, опираясь на анализ величин квантового электронного давления, $QEP(\mathbf{r})$, им выполнено сравнение сжимаемости разных типов химических связей таких как, $\text{NaI}\dots\text{NaI}$ и $\text{NaI}\dots\text{NaI}$ В-д-В и установлено, что первые обладают большим потенциалом сжимаемости.

Сопоставлены два разных подхода к решению задачи прогноза NLC: с помощью оценки модулей упругости, а также на основе изменений параметров кристаллической решетки. Это позволило диссертанту установить новые структурные факторы, которые отвечают за NLC $\alpha\text{-Ca}(\text{HCOO})_2$, и спрогнозировать диапазоны давления, отвечающие за NLC у HCOONa .

Также диссертантом впервые исследована функция $QEP(\mathbf{r})$ как инструмент описания и прогноза механического поведения серии кристаллов $(\text{HCOO})_n\text{M}^{n+}$.

Несомненной заслугой автора является получение и интерпретация новых фундаментальных данных при изучении природы отрицательной линейной сжимаемости на электронном уровне, что предполагает получение более полной и достоверной картины такого уникального механического свойства кристалла.

В целом, диссертант выполнил значительный объем расчетных работ на различных актуальных кристаллических объектах. Им использовано большое количество кристаллических структур с привлечением для расчетных работ широкого спектра современных пакетов компьютерных программ, что позволяет не сомневаться в достоверности полученных результатов и сделанных на их основе выводов.

Основные результаты научно-квалификационной работы отражены в 12 научных работах, 4 из них индексированы в международных наукометрических базах данных Scopus и Web of Science. Результаты работы были доложены на 7 конференциях, 5 из них международного уровня. Положительным моментом является и поддержка работы диссертанта грантом РФФИ, что дополнительно свидетельствует о ее актуальности.

По научно-квалификационной работе имеются небольшие замечания. В изложении материала наблюдаются стилистические неточности и некоторые опечатки.

В целом работу характеризует высокий научный уровень. Она представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, выполненную с использованием значительного набора современных расчетных программ и методов исследования. Основные результаты и выводы соответствуют решению поставленных задач и отражают новизну и актуальность выполненных диссертантом исследований. Они имеют научный и практический интерес.

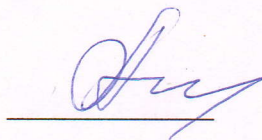
Содержание, объем, оформление автореферата и число публикаций полностью соответствует основным критериям диссертационной работы.

Полученные результаты могут быть использованы в научно-исследовательской практике организаций, занимающихся вопросами прогноза и теоретического описания механических свойств кристаллов при создании новых материалов на основе расчетных данных.

Указанные выше замечания не снижают значимости диссертационного исследования. Таким образом, по своему объему, актуальности, научной новизне и практической значимости диссертационная работа соответствует критериям, определенным п. 9 в соответствии с пунктом 28 "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., в

ред. от 18.03.2023, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Она является актуальной, завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком профессиональном уровне, а её автор, Собалев Сергей Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия.

Акопова Ольга Борисовна
Доктор химических наук,
Старший научный сотрудник,
E-mail: ob_akopova@mail.ru
ФГБОУ ВО «Ивановский
государственный университет,
ст.н.с. НИИ наноматериалов
153025 г. Иваново, ул. Ермака, 39,
Тел.: (4932) 37-08-08

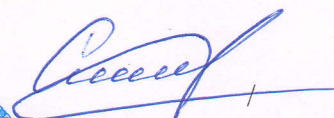


О. Б. Акопова

Согласна на обработку персональных данных.

29.11.2023 г.

Подпись Акоповой О. Б. заверяю:
Смирнова Инна Николаевна
Проректор по исследовательской и проектной деятельности



«29» ноября __2023 г.