

## 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 Сергея Александровича относится к фундаментальному исследованию строения и механических свойств молекулярных кристаллов. Безусловно, установление закономерностей между характеристиками нековалентных связей и механическими свойствами молекулярных кристаллов является важной задачей. Например, данные закономерности будут полезны для прогнозирования свойств материалов и дальнейшего их использования в различных устройствах. Более того, в настоящей работе проведено тестирование применимости функции квантового электронного давления как дескриптора, описывающего изменение свойств органических и неорганических кристаллов при механических деформациях. Таким образом, проблематика диссертационного исследования Собалева С.А., его актуальность, практическая значимость не вызывают сомнений.

В работе четко поставлены цели, задачи и сформулированы выводы.

Основное содержание работы изложено в двенадцати публикациях, четыре из которых опубликованы в высоко-рейтинговых международных научных журналах, а также неоднократно представлялось на международных и всероссийских конференциях. Содержание автореферата соответствует опубликованным работам.

Несмотря на очевидные достоинства, работа автора вызывает ряд замечаний.

1. В пункте 5 раздела «Научная новизна работы» присутствует фраза: «Впервые функция  $QEP(r)$  исследована как инструмент описания и...». Считаю неудачным использование слова «исследована» в данном контексте. Думаю, что корректнее было бы говорить, что исследована применимость или возможности использования этой функции как инструмента описания и прогноза механического поведения кристаллов.

2. В формуле (2) (стр. 7) присутствует член  $\gamma(r)$  значение которого не расшифровано. При этом в случае формулы (1) дана расшифровка всех обозначений.

3. На странице 8 автореферата присутствует предложение: «Для кристаллов тринитрохлорметана ( $Cl-C(NO_2)_3$ ), тринитробромметана ( $Br-C(NO_2)_3$ ) и тринитройодметана ( $I-C(NO_2)_3$ ) наилучшими оказались расчеты, которые проводились методом PBE0/rob-TZVP (2012) для атомов C, N, O, Cl и Br и PBE0/rob-TZVP (2018) для атома I». Но не указано, на основании чего сделан вывод, что данные расчеты оказались наилучшими.

Сделанные замечания носят рекомендательный, дискуссионный характер, не ставят под сомнения достоверность результатов и корректность выводов и не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Собалева Сергея Александровича.

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.

29 ноября 2023 г.

Отзыв составил:

Жабанов Юрий Александрович  
доктор химических наук (1.4.4. Физическая химия и  
1.4.1. Неорганическая химия),  
доцент кафедры физики  
Федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Ивановский государственный химико-  
технологический университет»  
153000, Иваново, Шереметевский пр-т, 7  
Тел. (моб.): +7 920 340 82 76  
Электронная почта: zhabanov@isuct.ru,  
zhabanov@gmail.com

Жабанов Юрий Александрович

«29» ноября 2023 г.

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

