

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

Диссертационное исследование С. А. Собалева посвящено установлению взаимосвязей между электронными характеристиками химических связей и механическими свойствами кристаллических фаз с органическими компонентами, изучаемых при моделировании их гидростатического сжатия. Для решения этой проблемы автором предложено использовать аппроксимированную функцию квантового электронного давления и соответствующий индикатор концентрации квантового давления. Автор выполнил моделирование гидростатического сжатия галогенсодержащих кристаллов. Он количественно оценил влияние типа нековалентных межатомных взаимодействий на гидростатическое сжатие кристаллов. В работе было успешно смоделировано внешнее гидростатическое сжатие кристаллов формиатов некоторых металлов, в которых наблюдается эффект отрицательной линейной сжимаемости, и описаны соответствующие наблюдаемые структурные изменения.

Таким образом, проведена теоретическая оценка и прогноз механического поведения кристаллов на основе квантово-химического моделирования гидростатического сжатия для серий молекулярных и ионных кристаллах с органическим анионом. Показана применимость функции квантового электронного давления для описания поведения электронного континуума при гидростатическом сжатии кристаллов. Установлено, что ключевую роль в предсказании механического поведения кристалла несет информация об изменении квантового электронного давления в пустотах и на нековалентных связях. Определены факторы, отвечающие за расширение кристаллов формиатов металлов в наблюдаемом направлении при моделировании

их гидростатического сжатия. Помимо очевидной научной значимости, полученные в рамках диссертационного исследования результаты могут быть полезны для понимания взаимосвязи «структура-свойство» для периодических кристаллических систем. Автором подчеркивается, что полученные в работе данные могут быть использованы в дальнейшем для построения прогностической модели для создания определенных функциональных материалов с заданными механическими свойствами. Полученные сведения о природе отрицательной линейной сжимаемости на электронном уровне имеют в дальнейшем прикладную значимость при разработке новых функциональных материалов, перспективных для создания датчиков давления, протекторов, искусственных мышц и приводов.

Результаты исследования неоднократно докладывались на конференциях различного уровня. Работа отличается прекрасным уровнем публикаций, которые полно и правильно отражают ее содержание. Основное содержание диссертации отражено в 4 статьях в журналах, рекомендованных ВАК РФ для опубликования основных результатов кандидатских и докторских диссертаций, а также в 7 тезисах конференций и 1 статье в вестнике. Статьи из списка опубликованы в лидирующих профильных журналах. Стоит отметить высокое качество оформления автореферата и иллюстрационного материала в нем.

В качестве замечаний по содержанию автореферата можно указать возможно неудачные формулировки. Например, выражение «сжимаемость формиатов металлов» не совсем точно. Сокращенную запись « α -(HCOO)₂Ca» или « β -(HCOO)₂Ca» я заменил бы на « α -фаза (HCOO)₂Ca» или « β -форма (HCOO)₂Ca». Аббревиатуру «NLC» для «отрицательной линейной сжимаемости» я бы заменил на «ОЛС». Однако, это ни в коей мере не умаляет достоинств работы и не снижает высокой оценки проделанной работы. Мои замечания носят лишь рекомендательный характер.

По актуальности темы, научной новизне, объему выполненных исследований, достоверности рассчитанных данных, обоснованности выводов и теоретической и практической значимости полученных результатов, а также оценивая работу в целом, считаю, что

диссертационная работа С.А. Соболева, судя по автореферату, является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для кристаллографии, научного материаловедения, физической и квантовой химии и химической физики.

Таким образом, 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.

Я, Роберт Рустемович Файзуллин, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Старший научный сотрудник лаборатории дифракционных методов исследований Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук (тел.: (843) 273-93-65, сайт <http://iopc.ru/>, email: arbuzov@iopc.ru, 420088, г. Казань, ул. Арбузова, дом 8), кандидат химических наук (02.00.03 – «Органическая химия»)

Роберт Рустемович Файзуллин (robert.fayzullin@gmail.com, тел.: (843) 272-75-73).



Подпись: *Роберт Рустемович Файзуллин*
Заверяю: *Моя отв. КСС*
Анисимова Е. В.
"6" декабря 2023.

6 декабря 2023 г.