

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* посвящена теоретическому исследованию взаимосвязи электронной структуры веществ с проявляемыми механическими свойствами. Следует отметить, что стремительный рост вычислительных мощностей в последние пару десятков лет позволил проводить довольно трудоёмкие расчёты по теоретическим моделям, близким к реальным объектам. Разработка и проверка таких моделей в настоящее время является крайне актуальной задачей. Не менее актуальным представляется также исследование поведения механических свойств соединений, в том числе, в условиях, недоступных в простых экспериментах и требующих дорогостоящего оборудования. На наш взгляд, в работа *Собалева С. А.* представляет пример удачного решения обозначенных задач, демонстрирует высокий уровень теоретического рассмотрения проблемы.

Вопросы и замечания:

1. В чём принципиальная разница между галогенными Ван-дер-Ваальсовыми контактами и галогенными связями, если оба типа взаимодействий имеют нековалентную природу?
2. Известно, что многие органические кристаллы способны к полиморфизму, связанному с существованием различных конформаций соединений. Кроме того, в реальных кристаллах отдельные группировки молекул склонны к разупорядочению за счёт относительно свободного вращения вокруг связей. В целом в кристаллах конформации молекул обычно не соответствуют геометрии, оптимизированной для вакуума. Учитывался ли вклад вращательно-колебательной компоненты в модель, и в каком виде?
3. На стр. 14 автореферата использован неверный термин «кристаллографическая ячейка». Следует использовать «элементарная ячейка» или «элементарная кристаллическая ячейка».

Высказанные замечания не влияют на общее положительное впечатление от представленной 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.

Слепухин Павел Александрович
Кандидат химических наук,
специальность 02.00.03 – органическая химия,
руководитель группы рентгеноструктурного анализа
ФГБУН Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН)
620137, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, дом 22/20
Тел. +7 (343) 3623224,
Электронная почта: slepukhin@ios.uran.ru

10 «сентября» 2023

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

Подпись Слепухина П.А. заверяю
Ученый секретарь ИОС УрО РАН

МП



10 «сентября» 2023

О.В. Красишнев