

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

Работа представляет собой теоретическое исследование свойств кристаллов с органическими компонентами с применением различных методов анализа электронной плотности для последующего описания гидростатического сжатия. В качестве основной микроскопической метрики было использовано квантовое электронное давление (QEP). Это достаточно новый дескриптор и его применение в данной работе свидетельствует о ее существенной новизне. Важность проводимых исследований связана с тем, что рассчитанные модули упругости при моделировании внешнего гидростатического сжатия могут быть использованы в дальнейшем для построения прогностической модели для создания определенных функциональных материалов с заданными механическими свойствами. Оценка электронных параметров нековалентных связей в кристаллах закладывает научную основу для понимания влияния свойств нековалентных связей на механические свойства материала. Исследование природы отрицательной линейной сжимаемости на электронном уровне позволяет получить более полную картину данного уникального механического свойства материала, что имеет в дальнейшем прикладную значимость при разработке новых функциональных материалов на его основе, используемых для создания датчиков давления, протекторов, искусственных мышц и приводов.

Автореферат написан хорошим языком и практически не содержит опечаток. В целом работа производит исключительно положительное впечатление.

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.

Хренова Мария Григорьевна
доктор физико-математических наук, профессор РАН
специальность 02.00.17 – математическая и квантовая химия,
профессор кафедры физической химии химического факультета
Федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Московский
государственный университет имени М.В.Ломоносова»
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1/3
Тел. +7 (495) 939 48 40,
Электронная почта: khrenovamg@my.msu.ru
01.12.2023

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

1.12.2023г

