

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

С ростом размера и сложности изучаемого на атомарном уровне объекта роль невалентных взаимодействий для предсказания его свойств как правило возрастает: начиная от низкомолекулярных комплексов, до супрамолекулярных агрегатов, мезопористых соединений и далее до конденсированных материалов. Понимание взаимосвязи между деталями электронного строения индивидуальных нековалентных химических связей и макроскопическими свойствами материалов – это путь к рациональному дизайну кристаллов и созданию новых функциональных материалов.

Выбор темы диссертационного исследования – изучение микроскопических причин возникновения того или иного отклика материала на механические деформации (в работе это делается через функцию квантового электронного давления, QEP) – представляется, безусловно, актуальным и практически значимым. Применены современные методы квантовой химии, продемонстрирована профессиональная квалификация автора. Содержание работы изложено в 4-х статьях и представлено в 7-ми докладах на конференциях, так что работу можно считать хорошо апробированной.

На примерах кристаллов галогенов, галогенбензолов, различных нитросоединений и формиатов металлов показано, что анализ функции QEP позволяет удовлетворительно воспроизвести целый ряд механических особенностей кристаллов. В целом прослеживается, как механическая жесткость кристаллов «подпружинена» относительно «рыхлыми» нековалентными связями, особенно с участием атомов с большими и легко поляризуемыми электронными оболочками (бром, йод), и как внутренние пустоты в кристаллах используются для компенсации внешнего давления. К достоинствам автореферата можно отнести приводимые сравнения с экспериментальными данными по направлениям осей минимального и максимального сжатия и по коэффициентам Пуассона. Также удачным с точки зрения дальнейшей работы представляется рассмотрение не полного пространственного распределения функции QEP, а ее значений только в критических точках связей, что позволяет сравнивать различные нековалентные взаимодействия между собой (в т.ч. при помощи функции IQPF).

К недостаткам автореферата можно отнести то, что положения, выносимые на защиту, сформулированы так, что опровергнуть их невозможно. Например, «свойства нековалентных связей разных типов... и их отклик на гидростатическое сжатие» – это, скорее, альтернативное название диссертации, чем защищаемое положение. На эту роль больше подходят основные выводы работы на стр. 19, которые сформулированы четко и хорошо отражают содержание работы. Данное замечание не изменяет общую положительную оценку 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.

Толстой Петр Михайлович

подпись

дата

6.12.2023

доктор химических наук,
специальность 1.4.4. Физическая химия,
профессор, заведующий кафедрой физической органической химии Института химии
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ)
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9
Тел. +7 (921) 430-81-91, электронная почта: peter.tolstoy@spbu.ru

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

Подпись Толстого П.М. заверяю

Дата: _____



06.12.2023