

Отзыв
научного руководителя
на диссертационную работу «Электронные свойства нековалентных связей
в описании механических свойств молекулярных кристаллов»
Собалева Сергея Александровича,
соискателя ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. Физическая химия

Собалев Сергей Александрович в 2023 г. окончил аспирантуру ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки». За время обучения в аспирантуре Собалев С.А. успешно справлялся с задачами научно-квалификационной работы, соблюдал сроки индивидуального плана работы аспиранта, проявил себя дисциплинированным и ответственным исследователем.

Тема диссертационного исследования Собалева С.А. начала формироваться еще на стадии его обучения в бакалавриате и магистратуре, поэтому ряд результатов, полученных на стадиях выполнения выпускных квалификационных работ был расширен и лег в основу диссертационного исследования. Интерес к теоретическим исследованиям и компьютерному моделированию по специальности «Физическая химия» подкреплялся участием Сергея Александровича в инициативном проекте РФФИ № 20-03-00240 по теме: “Природа механических свойств молекулярных кристаллов с выраженной ориентацией галогенных связей: уровень моделирования структуры и свойств электронной плотности”. В проекте молодой ученый работал активно, выполнял расчетные и аналитические задачи, связанные с моделированием геометрии кристаллов и вычислением их свойств.

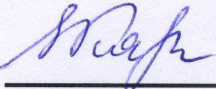
Диссертация Собалева С.А. посвящена исследованию функции квантового электронного давления, свойств химических связей разных типов и проявлению эффектов отрицательной линейной сжимаемости кристаллов. При работе по данной теме соискателю ученой степени пришлось столкнуться с новыми понятиями, лишь недавно предложенными в научной литературе, проверять смелые гипотезы, принимать решения о возможности применять те или иные инструменты на практике. Сталкиваясь с новыми и порой неожиданными данными, Сергей Александрович всегда подвергал их критической оценке, горячо обсуждал с коллегами. Таким образом, Сергей Александрович проявил себя как перспективный ученый, добивающийся объективных оценок на основе повышения достоверности данных и воспроизводимости результатов.

Собалев С. А. активно выступал с устными докладами на химических форумах, в том числе, на англоязычных международных конференциях, и не единожды его доклады были отмечены дипломами. Основные результаты научной работы Собалева С.А. изложены в 12 публикациях: 4 индексируются в международных наукометрических базах Scopus и/или Web of Science, 7 тезисов докладов на всероссийских и международных конференциях.

Уровень теоретической и практической подготовки Собалева С.А. позволил вести научную работу со студентами, ассистировать на лабораторных работах. Таким образом, Сергей Александрович готов к педагогической деятельности и работе со студентами.

Диссертационное исследование Собалева С.А. «Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных кристаллов» представляет собой законченную квалификационную работу, соответствующую всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Автор диссертации, Собалев Сергей Александрович, заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Д.х.н. (02.00.04 – Физическая химия), доцент Барташевич
Екатерина Владимировна, профессор кафедры ТиПХ;
в.н.с., зав. НИЛ «Многомасштабное моделирование
многокомпонентных функциональных материалов»
ФГАОУ ВО ЮУрГУ


12.09.2023

тел. +7 912 3137705; e-mail: bartashevichev@susu.ru
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Южно-Уральский
государственный университет (национальный исследовательский
университет)», 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76.



Подпись Барташевич удостоверяю
Начальник управления
по работе с кадрами И.С. Минакова