

## УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор – проректор  
по научной работе ФГАОУ ВО  
«ЮУрГУ (НИУ)»,

доктор технических наук, доцент

 А.В. Корзов

«20» 09 2023 г.



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации

Диссертация «Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных кристаллов» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия выполнена на кафедре «Теоретическая и прикладная химия» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».

В период подготовки диссертации соискатель Собалев Сергей Александрович с 2019 г. по 2023 г. проходил обучение в очной аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки 04.06.01. «Химические науки». С 2020 г. по настоящее время соискатель Собалев Сергей Александрович работает в должности младшего научного сотрудника научно-исследовательской лаборатории «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов» в федеральном государственном автономном образовательном учреждении

высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».

В 2017 г. окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки 04.03.01. Химия с присуждением квалификации «Бакалавр». В 2019 г. с отличием окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки 04.04.01. Химия с присуждением квалификации «Магистр».

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2023 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент Барташевич Екатерина Владимировна, профессор кафедры теоретической и прикладной химии; ведущий научный сотрудник, заведующий научно-исследовательской лабораторией «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».

Тема диссертации утверждена на заседании совета Института естественных и точных наук федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» 21.10.2019, протокол № 02.

По результатам рассмотрения диссертации «Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных

кристаллов» принято следующее **заключение:**

#### **Актуальность темы исследования.**

Механические свойства кристаллических соединений, такие как жёсткость, хрупкость, эластичность, являются существенным фактором, влияющим на возможность практического использования материалов в различных функциональных устройствах, а также в области фармакологии. Большой интерес представляет свойство отрицательной линейной сжимаемости (NLC), имеющее возможность применения в создании искусственных мышц, высокочувствительных датчиков давления, прочных амортизирующих материалов, «умных» протекторов, оптико-телекоммуникационных устройств, работающих при глубоководной атмосфере и для усиления отклика датчиков следующего поколения.

Понимание взаимосвязей между особенностями организации нековалентных связей в молекулярных кристаллах и их механическими свойствами открывает возможности целенаправленной модификации этих свойств путем изменения состава или структурной организации кристаллов за счет поиска их полиморфных модификаций.

Поиск новых количественных дескрипторов, достоверно описывающих изменение свойств органических и неорганических кристаллов при механических деформациях, чрезвычайно востребованы в задачах прогнозирования их механических свойств для разработки перспективных материалов с требуемым механическим поведением.

#### **Практическая значимость.**

Полученные в рамках исследования модели систем с рассчитанными модулями 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 прикладную значимость при разработке новых функциональных материалов на его основе, используемых для создания датчиков давления, протекторов, искусственных мышц и приводов.

### **Научная новизна работы.**

1. Теоретическая оценка и прогноз механического поведения кристаллов на основе квантово-химического моделирования гидростатического сжатия впервые произведена для серий кристаллов  $C_6Hal_6$ ,  $Hal_2$ ,  $Hal-C(NO_2)_3$  и  $(HCOO)_nM^{n+}$ .

2. Впервые на основе анализа величин квантового электронного давления,  $QEP(\mathbf{r})$ , произведено сравнение сжимаемости химических связей разных типов с ростом гидростатического давления; обнаружено, что  $Hal...Hal$  галогенные связи могут обладать бóльшим потенциалом сжимаемости, чем некоторые  $Hal...Hal$  ван-дер-ваальсовы взаимодействия.

3. Сопоставлены два альтернативных подхода к прогнозу отрицательной линейной сжимаемости: с помощью оценки модулей упругости и на основе изменений параметров кристаллической решетки.

4. Найдены новые структурные факторы, отвечающие за отрицательную линейную сжимаемость  $\alpha$ - $Ca(HCOO)_2$ ; спрогнозированы диапазоны давления, в которых проявляется отрицательная линейная сжимаемость  $HCOONa$ .

5. Впервые функция квантового электронного давления исследована как инструмент описания и прогноза механического поведения серии кристаллов  $(HCOO)_nM^{n+}$  с отрицательной линейной сжимаемостью.

**Личное участие** соискателя ученой степени в получении результатов, изложенных в диссертационной работе, состоит в следующем. Соискателем выполнена локализация равновесной геометрии кристаллов формиатов металлов, моделирование их гидростатического сжатия, расчет тензора упругости и получение собственных значений модулей упругости. В рамках

решения задач исследования соискателем выполнены работы по расчетам и изучению электронных характеристик кристаллов и молекул, в том числе: электронной плотности  $\rho(\mathbf{r})$  и ее градиентов, положительно определенной плотности кинетической энергии  $g(\mathbf{r})$ , квантового электронного давления  $QEP(\mathbf{r})$ , индикатора фокусировки квантового давления  $IQPF(\mathbf{r})$ ; анализ и интерпретация полученных результатов.

#### **Степень достоверности результатов проведенных исследований.**

Достоверность результатов обеспечивалась обращением к альтернативным методам теоретической оценки сжимаемости кристаллов, использованием широких серий кристаллических структур при оценке тенденций изменения их электронных свойств и применением современных методов моделирования кристаллической структуры с периодическими граничными условиями, реализованных в профессиональном программном пакете *CRYSTAL17*. Результаты моделирования, полученные в диссертационном исследовании, на каждом шаге сопоставлялись с имеющимися литературными данными, полученными с помощью экспериментальных изменений.

#### **Ценность научных работ соискателя ученой степени.**

Основные результаты, полученные в ходе выполнения диссертации, изложены в 12 научных работах.

Материалы диссертации полно представлены в работах, опубликованных соискателем.

**Статьи, опубликованные в научных журналах, индексируемых в международных наукометрических базах данных Scopus и/или Web of Science:**

1. Bartashevich, E.V. The Common Trends for the Halogen, Chalcogen, and Pnictogen Bonds Via Sorting Principles and Local Bonding Properties / E.V. Bartashevich, Y.V. Matveychuk, S.E. Mukhitdinova, S.A. Sobalev, M.G. Khrenova, V.G. Tsirelson // Theoretical Chemistry Accounts. – 2020. – V. 139. – Article ID: 26. – 13 p. (13 c. / 2 c.) (Scopus/WoS)

2. Bartashevich, E.V. Variations of Quantum Electronic Pressure under the External Compression in Crystals with Halogen Bonds Assembled in Cl<sub>3</sub>-, Br<sub>3</sub>-, I<sub>3</sub>-Synthons / E.V. Bartashevich, **S.A. Sobalev**, Y.V. Matveychuk, V.G. Tsirelson // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. – 2020. – V. 76, № 4. – P. 514–523. (10 c. / 3 c.) (Scopus/WoS)

3. Bartashevich, E.V. Simulation of the Compressibility of Isostructural Halogen Containing Crystals on Macro- and Microlevels / E.V. Bartashevich, **S.A. Sobalev**, Y.V. Matveychuk, V.G. Tsirelson // Journal of Structural Chemistry. – 2021. – V. 62, № 10. – P. 1607–1620. (14 c. / 4 c.) (Scopus/WoS)

4. Matveychuk, Y.V. Negative Linear Compressibility of Formate Crystals from the Viewpoint of Quantum Electronic Pressure / Y.V. Matveychuk, **S.A. Sobalev**, P.I. Borisova, E.V. Bartashevich, V.G. Tsirelson // Crystals. – 2023. – V. 13, № 7. – Article ID: 1147. – 18 p. (18 c. / 5 c.) (WoS)

#### **Другие публикации:**

5. Sobalev, S.A. Features of the Pnictogen Bonds Formed by Neighboring Nitro Groups in Crystals / **S.A. Sobalev**, E.V. Bartashevich, Y.V. Matveychuk // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия. – 2019. – Т. 11, № 4. – С. 66–75. (10 c. / 7 c.)

6. Собалев, С.А. Электронные критерии пниктогенных связей в молекулярных кристаллах нитросоединений / **С.А. Собалев** // Сборник тезисов XXVI Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2019», секция «Химия». – М.: Изд-во «Перо», 2019. – С. 826. (1 c. / 1 c.)

7. Matveychuk, Y.V. Crystal Compressibility and Quantum Electronic Pressure / Y.V. Matveychuk, **S.A. Sobalev**, E.V. Bartashevich // Book of abstracts of Quantum Crystallography Online Meeting 2020. – CentraleSupélec, 2020. – P. 27. (1 c. / 0,4 c.)

8. Sobalev, S.A. Quantum Electronic Pressure in Crystals with Cl...Cl, Br...Br, I...I Halogen Bonds under the External Hydrostatic Pressure / **S.A. Sobalev**, Y.V. Matveychuk, E.V. Bartashevich // Book of abstracts of Virtual

4<sup>th</sup> International Symposium on Halogen Bonding. – Stellenbosch, 2020. – P. 174.  
(1 с. / 0,6 с.)

9. Матвейчук, Ю.В. Сжимаемость кристаллов и пространственное распределение квантового электронного давления при гидростатическом сжатии // Ю.В. Матвейчук, С.А. Собалев, Е.В. Барташевич, В.Г. Цирельсон // Тезисы X Национальной кристаллохимической конференции. – Приэльбрусье, 2021. – С. 226-227. (2 с. / 0,5 с.)

10. Sobalev, S.A. Quantum Electronic Pressure as the Indicator of Halogen and Pnictogen Bonds in Molecular Crystals // S.A. Sobalev, Yu.V. Matveyhuk, E.V. Bartashevich // Book of abstracts of XII International Conference on Chemistry for Young Scientists «Mendeleev 2021». – St. Petersburg: SPBU, 2021. – P. 159.  
(1 с. / 0,6 с.)

11. Собалев, С.А. Особенности электронных характеристик кристаллов с отрицательной линейной сжимаемостью / С.А. Собалев, Ю.В. Матвейчук, П.И. Борисова, Е.В. Барташевич // Материалы 18-го Российского симпозиума «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования». – Новый Афон, 2022. – С. 19. (0,5 с. / 0,2 с.)

12. Собалев, С.А. Квантовое электронное давление в кристаллах формиатов металлов с отрицательной линейной сжимаемостью // С.А. Собалев, Ю.В. Матвейчук, П.И. Борисова и др. // Образование и наука для устойчивого развития: материалы XV Международной научно-практической конференции. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2023. – С. 122–124. (3 с. / 1,5 с.)

Публикации полностью соответствуют теме диссертационного исследования и раскрывают ее основные положения. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты.

Диссертационная работа соответствует требованиям, установленным п. 14 Положения о присуждении ученых степеней. Текст диссертации представляет собой самостоятельную научно-квалификационную работу, не

содержит заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования. По своему содержанию диссертация отвечает следующим пунктам паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия:

1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.

5. Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях.

11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении.

Диссертация «Электронные свойства нековалентных связей в описании механических свойств молекулярных кристаллов» Собалева Сергея Александровича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры «Теоретическая и прикладная химия» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».

**ПРИСУТСТВОВАЛИ:** Шарутина О.К., заведующий кафедрой «Теоретическая и прикладная химия», д.х.н.; Барташевич Е.В., профессор кафедры «Теоретическая и прикладная химия», д.х.н.; Макарова Т.М., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Сенчурин В.С., профессор кафедры «Теоретическая и прикладная химия», д.х.н.;



Рыбакова А.В., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Ильиных Е.С., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Тарасова Н.М., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Груба О.Н., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Вершинина Е.А., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Данилина Е.И., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия», к.х.н.; Бородина О.С., аспирант кафедры «Теоретическая и прикладная химия», м.н.с. НИЛ «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов»; Иняев И.В., доцент кафедры «Теоретическая и прикладная химия»; Артемьева Е.В., старший преподаватель кафедры «Теоретическая и прикладная химия»; Ефремов А.Н., старший преподаватель кафедры «Теоретическая и прикладная химия»; Малютина Е.М., старший преподаватель кафедры «Теоретическая и прикладная химия».

**ПРИГЛАШЕНЫ:** Винник Д.А., заведующий кафедрой «Материаловедение и физико-химия материалов», д.х.н.; Трофимов Е.А., профессор кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов», д.х.н.; Жеребцов Д.А., старший научный сотрудник кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов», д.х.н.; Живулин В.Е., старший научный сотрудник кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов»; Бескачко В.П., профессор кафедры «Физика наноразмерных систем», д.ф.-м.н.; Макаров Г.И., старший научный сотрудник НИЛ «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов», к.х.н.; Зыкова А.Р., научный сотрудник НИИ «Перспективные материалы и технологии ресурсосбережения», к.х.н.; Юшина И.Д., научный сотрудник НИЛ «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов», к.х.н.; Авдин В.В., заведующий кафедрой «Экология и химическая технология», д.х.н.; Гудкова С.А., старший научный сотрудник лаборатории «Рост

кристаллов», к.ф.-м.н.; Созыкин С.А., доцент кафедры «Физика наноразмерных систем», к.ф.-м.н.

**ВЫСТУПИЛИ:** Бескачко В.П., профессор кафедры «Физика наноразмерных систем», д.ф.-м.н.; Живулин В.Е., старший научный сотрудник кафедры «Материаловедение и физико-химия материалов», к.ф.-м.н.; Барташевич Е.В., д.х.н., ведущий научный сотрудник НИЛ «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов».

Результаты голосования «за» – 26 чел., «против» – 0 чел., «воздержались» – 0 чел., протокол № 2 от «15» сентября 2023 г.

Председательствующий на заседании,

доктор химических наук, профессор,

заведующий кафедрой «Теоретическая

и прикладная химия» ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)»

О.К. Шарутина

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Россия, 454080, Челябинск, пр. Ленина, 76

Телефон/факс: +7(351) 267-99-00, E-mail: [info@susu.ru](mailto:info@susu.ru)

<http://www.susu.ru>



Подпись Шарутина О.К. удостоверяю  
Начальник управления  
по работе с кадрами ИУИ Н.С. Минамова