

## ОТЗЫВ

На автореферат диссертации **Ананьева Ивана Владиславовича** “Устойчивость молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов и прочность межатомных взаимодействий в теории «Атомы в Молекулах»” на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа **Ананьева Ивана Владиславовича** посвящена теоретическим исследованиям электронного строения химических соединений и развитию методов описания их электронной структуры в координатном пространстве. Автор поставил цель найти подходы, опирающиеся на орбитально-независимый инструментарий исследования строения вещества, согласующийся между тем, как с орбитальными представлениями, получаемыми на основе квантово-химических расчетов, так и с эмпирическим опытом, извлекаемым из экспериментальных данных о свойствах химической связи и физико-химических свойствах обширного ряда соединений разных классов. В частности, в работе решена совокупность актуальных задач, ориентированных на обнаружение и количественную оценку свойств многоцентрового межатомного связывания на основе анализа электронной плотности и применения орбитально-независимых дескрипторов.

Научная новизна полученных результатов не вызывает сомнений. В работе впервые использованы приемы, основанные на взаимосвязях формы супрамолекулярной поверхности с геометрией нековалентных взаимодействий в кристалле или молекулярном агрегате; впервые найдены и продемонстрированы эффекты, определяющие взаимосвязь устойчивости графа связности в квантово-топологической теории атомов в молекулах и динамики атомных смещений в кристаллах. Разработаны оригинальные модули собственного программного обеспечения, в котором реализованы новые подходы. Большой объем проделанной вычислительной и аналитической работы, как на методологическом, так и теоретическом уровне положительно характеризуют диссертационную работу Ананьева И.В.

Практическая и научная значимость работы обоснована тем, что разработанная методология, а именно, подходы для оценки эффективных силовых постоянных и связывающих вкладов, получаемых из характеристик одночастичной матрицы плотности могут улучшить и развить современные подходы к технологиям разработки материалов. Теоретически обосновано использование характеристики – плотности вещества для объяснения чувствительности к удару кристаллов высокоэнергетических соединений. Обнаружено, что слабые межмолекулярные взаимодействия в кристаллах парамагнитных соединений, могут оказывать определяющее влияние на проявление магнитных свойств. Таким образом, в диссертационной работе получена и систематизирована информация, полезная для прогноза свойств и рационального поиска новых соединений с требуемыми свойствами.

Имеется замечание, изложенное ниже.

1. Довольно неожиданным явился выбор автором диссертации новой аббревиатуры "ТАМ" для краткого обозначения широко известной квантово-топологической теории "Атомы в Молекулах" – QТАИМ. Вряд ли оно приживется за пределами научно-квалификационной работы. В целом, автореферат изобилует аббревиатурами и инновационными определениями понятий или такими их формулировками, которые не всегда делают сами понятия узнаваемыми при первом прочтении их формулировок.

Сделанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Ананьева Ивана Владиславовича. Диссертационная работа представляет собой оригинальное и скрупулезное научное исследование, выполненное на современном уровне с использованием новейших инструментов, в том числе, разработанных автором. Совокупность полученных результатов вносит неоспоримый вклад в развитие актуальной и востребованной методологии, ориентированной на анализ электронного строения и прогнозирование физико-химических свойств новых соединений, в том числе, кристаллических, использование которых улучшит качество материалов с заданными функциональными свойствами. Материалы диссертации, изложенные в публикациях автора, представляет интерес для специалистов и обучающихся по направлениям физической химии, хемоинформатики; их целесообразно использовать в учебных курсах образовательных программ подготовки кадров высшей квалификации (аспирантов).

По своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов, диссертационная работа соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а её автор, Ананьев Иван Владиславович достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор химических наук (1.4.4 – Физическая химия), доцент,  
профессор кафедры теоретической и прикладной химии  
ЮУрГУ, в.н.с., заведующий НИЛ Многомасштабного  
моделирования многокомпонентных функциональных  
материалов

Барташевич Екатерина Владимировна  
тел. +7 (351) 263-1111; e-mail: [ekaterina.bartashevich@yuzhuryu.ru](mailto:ekaterina.bartashevich@yuzhuryu.ru)

12.08.2024

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Южно-Уральский  
государственный университет (национальный  
исследовательский университет)», 454080, Россия,  
г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: +7 (351) 263-1111  
e-mail: [info@yuzhuryu.ru](mailto:info@yuzhuryu.ru), сайт: [www.yuzhuryu.ru](http://www.yuzhuryu.ru)

ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ

Начальник отдела кадров