

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертации Ананьева Ивана Вячеславовича на тему: «Устойчивость молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов и прочность межатомных взаимодействий в теории «Атомы в Молекулах», представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Ананьева И.В. посвящена разработке методов оценки характеристик межатомных взаимодействий различной природы с опорой на квантово-механический анализ функции электронной плотности. Решаемые в данной работе проблемы являются актуальными для физической химии как в теоретическом, так и в практическом плане. Это связано с тем, что в последние десятилетия резко возросло количество прецизионных данных по электронной плотности в молекулах и кристаллах, полученных как из первых принципов, так и экспериментально. Анализ этих данных позволяет выявить общие закономерности в формировании систем химических связей и прогнозировать связанные с этим свойства веществ и материалов. Вместе с тем, известные методы анализа имеют свои недостатки, преодолению которых и посвящена диссертационная работа.

Автором предложены оригинальные подходы к анализу свойств так называемого «топологического» атома, то есть области в кристалле, которая относится к данному атому в рамках известной теории Бейдера «Атомы в Молекулах». Показано, что свойства поверхности «топологического» атома могут быть использованы для оценки прочности и насыщаемости химических взаимодействий различной природы, в том числе в динамических процессах. Предложенные подходы успешно апробированы на многочисленных примерах соединений, принадлежащих к различным химическим классам и взаимодействий различного типа и прочности. Можно утверждать, что автором создано новое направление в теоретической химии,

связанное с топологическим анализом химических взаимодействий в молекулах и кристаллах, опираясь на одночастичную матрицу плотности.

При прочтении автореферата возникает вопрос, рассматривал ли автор корреляции предложенного им подхода с качественными геометрическими подходами, связанными с представлением атома в виде его полиэдра Вороного. Есть ли (или могут ли быть) взаимосвязи между площадью поверхности, объемом, размером граней полиэдров Вороного атомов и их характеристиками в рамках теории Бейдера и конкретно подхода автора?

Существенных замечаний к автореферату нет. Автором проделана большая работа, значимость которой подтверждена многочисленными публикациями в журналах высокого уровня и докладами на всероссийских конференциях. Проведенные исследования по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов полностью соответствуют критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а автор Ананьев Иван Вячеславович достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4- Физическая химия.

Заведующий кафедрой

«Общая и неорганическая химия»

д.х.н., профессор

Блатов Владислав Анатольевич

ФГБОУ ВО «СамГТУ»

Адрес: 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 24

Тел: +

Email:

05 сентября 2024 г.