

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ И.В. АНАНЬЕВА  
«УСТОЙЧИВОСТЬ МОЛЕКУЛ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ АССОЦИАТОВ  
И КРИСТАЛЛОВ И ПРОЧНОСТЬ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В  
ТЕОРИИ «АТОМЫ В МОЛЕКУЛАХ»», ПРЕДСТАВЛЕННОЙ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА ФИЗИКО-  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ 1.4.4 –  
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ.

Работа представляет собой актуальное исследование по физической химии в области строения молекул. Полученные в работе результаты являются актуальными как с точки зрения изучения природы химических связей, так и с точки зрения развития теории функционала плотности. В совокупности опубликованных работ, автор успешно развивает Бейдеровскую теорию «атомы в молекулах» и применяет разработанные им методы для решения широкого круга задач физической химии, включающего исследования структуры и свойств кристаллов с ненаправленными и/или многоцентровыми взаимодействиями, описание которых оказывается проблематичным в рамках двухцентрового формализма. Существенным элементом научной новизны выполненной работы является отказ как от орбитальной парадигмы, так и двухэлектронных методов описания электронной структуры при оценке вкладов связывающих межатомных взаимодействий в энергию и подвижность многоатомных систем в пользу орбитально-независимых дескрипторов, опирающихся на одноэлектронную матрицу плотности и, в частности, на экспериментально достижимую функцию электронной плотности. Среди практически значимых результатов работы необходимо отметить разработку целого набора методов исследования природы межатомных взаимодействий на основании матрицы плотности первого порядка, работоспособного как в кластерном приближении, так и в кристаллах.

Замечания по существу работы отсутствуют, однако есть два вопроса, затрагивающих, скорее, дальнейшее развитие данного исследования:

1. Насколько ресурсозатратны проводимые автором расчеты по поиску межатомных поверхностей и интегрированию по ним? Делались ли попытки тренировки нейросетевых моделей для масштабирования разработанных автором методов на системы с большим числом атомов, например, на макромолекулы?
2. Насколько чувствительны предлагаемые методы оценки прочности межатомных взаимодействий к типу обменно-корреляционного функционала?

Работа в целом является научно-квалификационной работой, которая по своей актуальности, научной новизне, объему, практической значимости полученных результатов полностью соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а сам диссертант – Ананьев Иван Вячеславович – безусловно достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор физико-математических наук (03.01.02 – Биофизика), заведующий Лабораторией структурного анализа биомacroмолекул Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр РАН» (420111, г. Казань, ул. Лобачевского, 2/31), Усачев Константин Сергеевич, k.usachev@knc.ru, (843) 231-90-61.

\_\_\_\_ К.С. Усачев  
22.08.2024