

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации Ананьева Ивана Вячеславовича  
«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

Диссертационная работа Ананьева Ивана Вячеславовича посвящена разработке методов описания электронной структуры химических соединений в координатном пространстве и приложению этих методов для исследований свойств молекул, супрамолекулярных систем и кристаллов.

В работе развиты методы анализа распределения электронной плотности, позволяющие получить данные о прочности химической связи между атомными фрагментами, вкладах связывающих взаимодействий, объяснить температурные изменения взаимодействий и их анизотропии, влияние на стабилизацию химических веществ. Разработанные подходы для изучения межатомных взаимодействий позволяют получить количественную оценку их характеристик из экспериментальных рентгеновских данных и могут быть использованы при исследовании структурных фазовых переходов, изменений теплового движения атомов, динамических процессов, макро- и микроскопического разупорядочения в кристаллах, что обуславливает несомненную актуальность и научную значимость работы.

Проведенные исследования кристаллических материалов расширяют знания о закономерных связях их состава, структуры и физических свойств, а предложенные методы могут быть также успешно применены для решения широкого круга задач физической химии, кристаллографии, физического материаловедения. Важным результатом работы является подтверждение особой роли невалентных и других слабых взаимодействий в структурных трансформациях, что одновременно свидетельствует об эффективности и точности предложенных подходов при изучении межатомных взаимодействий и определении характеристик прочности топологической связи.

Другая открывающаяся перспектива для разработанных подходов – изучение температурных зависимостей дескрипторов химической связи. Также отметим, что богатство фактического материала дает возможности для построения функциональных зависимостей топологических дескрипторов от атомного окружения и химических сортов атомов.

В качестве замечания, не влияющего на значимость работы, - это использование выражений «локализация электронов», «способы / методы локализации», которое отличается от описания «локализации» в структурном анализе.

Большой объем работы, выполненный Ананьевым И.В., по получению новых экспериментальных данных для целого ряда соединений и их систематическому анализу позволил получить обоснованные научные выводы, которые вносят весомый вклад в

решение фундаментальных проблем в области физической химии. О высоком научном уровне диссертационной работы свидетельствуют и публикации в высокорейтинговых научных изданиях. Основное содержание работы изложено в 62 статьях в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ. Работа апробирована на международных и всероссийских конференциях.

Диссертационная работа по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствуют критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», оформлена согласно требованиям Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. а Ананьев Иван Вячеславович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4- Физическая химия.

Макарова Ирина Павловна

Доктор физико-математических наук (специальность 01.04.18 – Кристаллография, физика кристаллов)

Ведущий научный сотрудник лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения Института кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»

Адрес: 119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59

Тел.: 8

E-mail:

Я, Макарова Ирина Павловна, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

02 сентября 2024 г.

Дудка Александр Петрович

Доктор физико-математических наук (специальность 01.04.18 – Кристаллография, физика кристаллов)

Ведущий научный сотрудник лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения Института кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»

Адрес: 119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59

Тел.: 8

E-mail:

Я, Дудка Александр Петрович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

02 сентября 2024 г.

Подписи д.ф.-м.н. Макаровой И.П. и д.ф.-м.н. Дудки А.П. заверяю.

Титова А.Н.