

## Отзыв

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

Данная диссертационная работа посвящена разработке одноэлектронных методов исследования электронной структуры химических соединений в координатном пространстве, а также приложению этих методов для исследований различных свойств молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов. В работе успешно развивается подход, ранее предложенный Р. Бейдером, пользующийся популярностью у химиков. Получен ряд новых интересных результатов, имеющих важное теоретическое и прикладное значение. Например, применение концепции топологической связи для описания определенных динамических процессов, переходов типа спин-кроссовер переходных металлов и динамического разупорядочения в ряде многокомпонентных кристаллов. На мой взгляд, развитые в работе методы могут лечь в основы магистерских программ химических специальностей МГУ, РУДН, СПбГУ и ряда других известных университетов РФ.

Основное содержание диссертации достаточно полно изложено в 62 статьях в рецензируемых научных журналах, относящихся к базам данных Web of Science, Scopus, RSCI, и доложено на представительных конференциях.

По своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов, проведенные исследования соответствуют критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова». А их автор достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4- Физическая химия.

Боженко Константин Викторович

доктор химических наук

профессор

142432, г. Черноголовка Московской обл. Проспект Академика Н.Н.Семенова, 1  
8(916) 073 74 35

kbogenko@mail.ru

государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, лаборатория структурной химии, главный научный сотрудник.

17 . 08 . 2024