

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук Ананьева Ивана Вячеславовича на тему: «Устойчивость молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов и прочность межатомных взаимодействий в теории «Атомы в Молекулах»», специальность 1.4.4 - Физическая химия.

Основной задачей диссертационного исследования Ананьева И.В. была разработка методологии исследования устойчивости и свойств молекул и супрамолекулярных структур с целью описания электронной структуры химических соединений в координатном пространстве. Для этого планировалось создание математического аппарата, позволяющего определять прочность топологической связи, выполнять оценку энергетических характеристик и жесткости связей в области минимума энергии многоатомных систем, а также выявлять критерии, позволяющие детектировать многоцентровое межатомное связывание.

В результате проведенных систематических исследований широкого круга объектов автором было убедительно доказано, что предложенные им подходы к описанию электронной структуры в координатном пространстве позволяют построить орбитально-инвариантную теорию химической связи. Разработанный унифицированный метод оценки энергии невалентных взаимодействий показал высокую эффективность при изучении различных типов межмолекулярных взаимодействий. Был предложен оригинальный подход, позволяющий изучать связывающие атомные взаимодействия, плохо описываемые в двухцентровом приближении, который заключается в анализе набора топологических связей, получаемых при возмущениях электронной плотности при сдвигах атомных ядер. Продемонстрировано влияние многоцентровых направленных взаимодействий на стабилизацию определенных типов кристаллической упаковки.

При ознакомлении с хорошо оформленным и тщательно вычитанным авторефератом возникло несколько вопросов и замечаний, требующих пояснений.


1. Представляются неожиданно высокими энергии стабилизации комплексов кобальта, приведенные на стр. 28. Не являются ли они следствием практически не обсуждаемых в работе электростатических взаимодействий? Квантово-химические расчёты нейтральных систем, например, включающих молекулы бензойной кислоты, дихлорида кобальта и диметилпиразола в левой части уравнения и соответствующий комплекс с остатками в правой части могли бы помочь с ответом на данный вопрос.

2. На этой же странице имеется информация о проведении квантово-химических расчетов комплексов лантоноидов, однако в указанных работах [26,27] о DFT исследованиях не сообщалось.

3. Автор использовал разработанный им теоретический аппарат для интерпретации многоцентровых взаимодействий, было бы интересно сравнить полученные результаты с предсказываемыми другими методами, например AdNDP (adaptive natural density partitioning method).

4. Как предложенный подход к анализу распределения электронной плотности классифицирует широко дискутируемое в научной литературе Н-Н взаимодействие в фенантрене: как репульсивное или как аттрактивное?

Представленная диссертационная работа, результаты которой опубликованы в более чем 60-ти статьях в рецензируемых научных журналах, несомненно, вносит весомый вклад в развитие теории химической связи и её результаты существенно совершенствуют математический аппарат квантово-топологической теории «Атомы в Молекулах». Можно заключить, что проведенные исследования по своей актуальности, научной новизне 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», а её автор достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4- Физическая химия.

Стариков Андрей Георгиевич
доктор химических наук
специальность 02.00.04 – физическая химия
главный научный сотрудник НИИ физической и органической химии
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»,
344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки 194/2,
НИИ ФОХ ЮФУ, т. 3
Электронная почта: 
03.09.2024г.