

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.

Работа соискателя посвящена фундаментальной области исследований, основанной на теории «Атомы в Молекулах» (ТАМ), по развитию методов координатного пространства (МКП), позволяющих локализовать электроны в реальном (3D) пространстве для исследования особенностей поверхности потенциальной энергии (ППЭ), как с точки зрения изучения природы химических связей, так и с точки зрения развития теории функционала плотности. Очевидно, что это определяет **актуальность и научную ценность**, настоящей диссертационной работы. Фактически, автор в настоящей работе предлагает новые одноэлектронные методы описания электронной структуры химических соединений в 3D пространстве, что собственно и являются **целью** настоящей диссертации. По сути, разрабатывая новые методы, автор пытается решить ряд проблем в рамках ТАМ. Одна из которых, описание динамических процессов, а другая - описание невалентных и многоцентровых взаимодействий. **Положения** (задачи), вынесенные на защиту, логично аргументированы большим количеством примеров, которые подтверждают возможность использования одночастичной матрицы плотности (1-МП) для решения широкого круга физико-химических задач в 3D-пространстве с приемлемой точностью. Главной идеей работы является отказ от орбитальной парадигмы и от методов 2-МП. В отличие от 2-МП, 1-МП можно получить экспериментально, при помощи дифракции рентгеновских лучей. Согласно автореферату, автором по теме исследования опубликовано 62 статьи в ведущих российских и зарубежных журналах, что свидетельствует о

признании научной общественностью его методов в рамках ТАМ. Несмотря на логично построенный и хорошо написанный автореферат к автору имеется ряд вопросов, не умаляющих научную ценность работы.

- 1) Стр.17, «Проведенные нами квантово- химические расчеты (CCSD/aug-cc-pVTZ) атомов и малых молекул показывают (рис.1), что поведение функции $f_{\delta}(\mathbf{r}_{\Omega})$ наглядно отражает локализацию электронов, отвечающую как внутренним оболочкам атомов, так и образованию топологической связи и позициям неподеленных электронных пар.»

Известно, что лапласиан электронной плотности также отражает локализацию внутренних оболочек атомов, но только до атома сурьмы. Вопрос, отражает ли функция $f_{\delta}(\mathbf{r}_{\Omega})$ локализацию внутренних оболочек лантаноидов и актиноидов?

- 2) Стр.19 «Нелинейная оптимизация.....». Не совсем ясно, что такое нелинейная оптимизация? Может быть просто оптимизация?
- 3) Стр. 32, Этот вопрос связан с бифуркатными взаимодействиями, которые не всегда удастся выявить в рамках ТАМ. Возможно, что кривизна электронной плотности у соответствующих взаимодействий слишком малая, в результате чего не находится соответствующая $KT(3,-1)$ и связевый путь. Вопрос, не пробовал ли диссертант использовать другие дескрипторы (индекс нековалентных взаимодействий, функцию источника, индекс делокализации) для нахождения этого взаимодействия?

Можно заключить, что 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

достоин присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор химических наук, проф. РАН

Фукин Георгий Константинович

Почтовый адрес: 603137, г. Нижний Новгород, ул. Тропинина, 49

Телефон: 8

Адрес электронной почты:

1

Организация – место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, сектор рентгенодифракционных исследований

Должность: ведущий научный сотрудник, руководитель сектора

Web-сайт организации: www.iomc.ras.ru

Подпись Фукина Г.К. заверяю:

Начальник отдела кадров ИМХ РАН

Е.В. Муравьева

06.09.2024

