

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Анисимова Алексея Альбертовича на тему:  
**«Анализ прочности топологического связывания как метод оценки вкладов в  
энергию взаимодействия квантовых атомов»**,  
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по  
специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Диссертационная работа Анисимова А. А. посвящена исследованию взаимосвязи между особенностями искажения градиентного поля электронной плотности и вкладов в энергию межатомного взаимодействия, определенных в рамках формализма взаимодействующих квантовых атомов (IQA). В работе предлагается мера электронной (де)локализации, измеряющая степень (де)локализации заряда в атомных бассейнах, и демонстрируется ее связь с новой мерой прочности топологического связывания атомов. Используя модельные представления квантовой химии (приближение локальной плотности) и численные параметрические модели, демонстрируется взаимосвязанность топологической прочности с обменно-корреляционной компонентной межатомной энергии IQA,  $V_{xc}^{AB}$ , а также с энергией деформации. Указанные результаты хорошо согласуются с математически не формализованными представлениями об упрочнении связывания атомов в молекулах и кристаллах, сопровождающихся повышением локализации электронов (например, в ходе образовании химической связи). Также несомненным достоинством работы является демонстрация косвенной взаимосвязи между явлениями (де)локализации заряда и электронных пар.

Достоверность полученных результатов подтверждается рассмотрением широкого набора атомов, молекул, ионов, молекулярных комплексов и обширных кластеров; а также проведением расчетов различными, в том числе высокоточными, методами квантовой химии. Отдельно следует отметить прикладную значимость частей работы, связанных с имплементацией алгоритма построения поверхностей нулевого потока, адаптированного под требуемую точность интегрирования рассмотренных свойств по поверхностям атомных бассейнов.

Следует отметить, что автореферат написан понятным языком, имеет четкую структуру и оставляет крайне благоприятное впечатление. Незначительным минусом

изложения является отсутствие обсуждения согласованности размерностей параметрической модели и  $V_{xc}^{AB}$ . Тем не менее, это не снижает высокой оценки научных достижений Анисимова А. А. и общей ясности изложения.

По результатам исследования опубликованы 4 статьи в российских и международных журналах с высокой репутацией, причем во всех публикациях Анисимов А. А. является первым автором. Работа также неоднократно проходила апробацию на конференциях.

Таким образом, можно заключить, что полученные Анисимовым А. А. результаты следует рассматривать как достижение в области методов компьютерного моделирования в физической химии, что соответствует паспорту специальности 1.4.4 – «Физическая химия» и требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Анисимов А. А. бесспорно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Автор отзыва:

Левина Елена Олеговна, кандидат физико-математических наук (02.00.04 – Физическая химия), научный сотрудник лаборатории квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук.

Контактная информация: +79055743406; levina.eo@phystech.edu; 119071 Москва, Ленинский просп., 31.

26 января 2024 г.

