

## ОТЗЫВ

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

Однозначное выявление наличия и/или изменения химических связей в том или ином превращении является центральной задачей химии. Однако, к сожалению, выделение аттрактивных взаимодействий из всей совокупности межатомных взаимодействий (внутри и межмолекулярных) в известной степени произвольно. В любой молекуле всегда присутствует большое число вынужденных контактов, и при определении их природы, помимо эмпирических параметров, мы вынуждены обращаться к плохо параметризуемой "химической логике". Несмотря на то, что химическая связь является центральным понятием в химии, необходимого и достаточного критерия ее наличия теоретическая химия так и не выработала. Это особенно проявляется при анализе невалентных (вторичных) взаимодействий, которые играют огромную роль при стабилизации молекулярной конформации, формировании определенной супрамолекулярной кристаллической структуры или выступают в качестве «канала реакции». Неменьшей проблемой является и оценка энергетического вклада конкретного химического взаимодействия. Поэтому поставленная автором задача выявления связывающих взаимодействий и оценка их энергетических вкладов является несомненно актуальной.

Важным отличием представленной работы является тот факт, что автор не столько добавил к большому числу примеров успешного использования теории Р.Ф. Бейдера "Атомы в Молекулах" и меньшему числу примеров использования теории взаимодействующих атомов (IQA) свои собственные, а занялся решением нетривиальной задачи выявлению закономерностей,

связывающих топологию электронной плотности с различными вкладами в энергию межатомных взаимодействий. Учитывая трудоемкость расчетов в рамках IQA, полученные Алексеем Альбертовичем подходы к оценке всех вкладов в энергию для невалентных взаимодействий обладает новизной и несомненной научной значимостью.

Работа очень хорошо и детально изложена. Очень хотелось бы отметить литературный обзор за безупречный стиль и детальное осмысление современного состояния в данной области. Представленный автореферат, на мой взгляд, не содержит существенных недостатков, в качестве замечания можно отметить, что в достаточно большом разделе автор не всегда точно ограничивает область применения предлагаемых подходов. Так, в частности, можно привести такой пример из диссертации «Однако, входящие в  $E_{def}$  энергии изменения спинового состояния и переноса заряда вряд ли можно выразить через поверхностный интеграл для связанной системы, поскольку последняя не может хранить информацию о данных характеристиках до образования связи. Тем не менее, можно ожидать, что в случае исчезающе малого вклада этих двух эффектов, например, для невалентных взаимодействий, интеграл  $\rho(r\Omega)$  по IAS вполне может быть связан с  $E_{def}$ ». Было бы желательно, чтобы в дальнейшем автор больше уделял внимание не качественным, а численным критериям. Вместе с тем, указанные замечания несколько не умаляют значимости диссертационного исследования. Автореферат хорошо оформлен и ясно излагает основное содержание работы, достоверность и новизна результатов не вызывает сомнений. Основные научные положения, представленные в автореферате, полностью обоснованы, выводы аргументированы. По результатам работы автором опубликовано 4 статьи в рецензируемых журналах и представлены доклады в том числе и на всероссийской конференции с международным участием. Выполненная диссертационная работа Анисимова Алексея Альбертовича полностью соответствуют критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением

Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года в действующей редакции, и ее автор безусловно заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия.

Я, Лысенко Константин Александрович, даю согласие на использование и обработку моих персональных данных на нужды, связанные с работой диссертационного совета 24.1.161.01.

*Лысенко*

доктор химических наук, профессор кафедры физической химии  
Химического факультета МГУ, профессор РАН  
Лысенко Константин Александрович

Адрес места работы: 119991, Российская Федерация, г. Москва, ул.  
Ленинские горы, д. 1, стр. 3 ФГБОУ ВО «Московский государственный  
университет имени М.В. Ломоносова», Химический факультет  
Телефон: +7-916-4756535, klyssenko@gmail.com

