

УТВЕРЖДАЮ

И.о. директора ИНЭОС РАН

Чл.-корр. РАН д.х.н. А.А. Трифонов

«07» 12 2023г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова  
Российской академии наук (ИНЭОС РАН)

**Диссертационная работа** «Анализ прочности топологического связывания как метод оценки вкладов в энергию взаимодействия квантовых атомов» **выполнена** Анисимовым Алексеем Альбертовичем в лаборатории рентгеноструктурных исследований ИНЭОС РАН. При подготовке и выполнении работы Анисимов А.А. обучался в очной аспирантуре (2021-2023 гг.) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН) и работал в лаборатории рентгеноструктурных исследований в должности старшего лаборанта (2018-2021 гг.), с 2021 года по настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника в той же лаборатории.

Анисимов А.А. окончил в 2021 г. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия», получив квалификацию «Химик. Преподаватель химии». Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2023 году Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН).

**Научный руководитель:** Ананьев Иван Вячеславович, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории рентгеноструктурных исследований ИНЭОС РАН.

**В ходе обсуждения диссертанту были заданы следующие вопросы:**

- к.х.н. Федянин И.В.: Насколько сильно изменяются параметры в предлагаемых моделях при использовании неравновесных геометрий ядер в рассматриваемых системах?
- к.ф-м.н. Супоницкий К.Ю.: Мультиполи вплоть до какого порядка вы использовали в вашем разложении чтобы получить линейные регрессии с удовлетворительной средней абсолютной ошибкой? Насколько вообще с точки зрения теоретической квантовой механики мультипольное разложение применимо к описанию кулоновских взаимодействий?
- к.ф-м.н. Сташ А.И.: Насколько сильно предложенный алгоритм генерации скелетных лучей для описания поверхностей нулевого потока электронной плотности уступает по времени существующим подходам? И каким образом определяются границы межатомных поверхностей в рамках нового алгоритма?
- д.х.н. Федорова О.А.: Могут ли восстанавливаемые энергетические компоненты по отдельности использоваться для описания каких-либо характеристик химической связи?

**По итогам заседания коллоквиума принято следующее решение:**

Диссертационная работа Анисимова Алексея Альбертовича имеет важное теоретическое и практическое значение в области физической химии и служит существенным вкладом в развитие представлений о природе взаимодействий между атомами в реальном пространстве. В работе предлагается эффективная и существенно менее ресурсозатратная альтернатива стандартным алгоритмам получения компонент энергии связывания, а отсутствие необходимости в двухчастичной матрице плотности делает возможным применение разработанного метода к экспериментальной электронной плотности, восстановленной по данным рентгеновской дифракции высокого разрешения. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, интерпретация полученных результатов не вызывает возражений, автором работы четко и обоснованно сформулированы выводы, а достоверность не вызывает сомнений.

**Личный вклад автора** состоит в непосредственном участии во всех этапах диссертационного исследования: постановке задачи, анализу литературных данных, разработке и имплементации новых алгоритмов, проведении квантово-химических расчетов, обработке, обсуждении и оформлении полученных данных, подготовке и написанию научных публикаций.

**Научная новизна и практическая значимость работы.** В рамках диссертационного исследования была предложена новая метрика прочности топологического связывания, основанная на специфическом интеграле по межатомной поверхности нулевого потока электронной плотности и связанная с ней новая функция (де)локализации электронов внутри атомных бассейнов. Для выявленной метрики прочности топологического связывания была обнаружена качественная зависимость от энергии квантовых обменно-корреляционных эффектов. Разработана параметрическая модель, позволяющая с достаточно высокой точностью и сравнительной простотой получать обменно-корреляционную компоненту в случае двухатомных систем, а также обменно-корреляционную компоненту и энергию деформации в случае межмолекулярных энергий взаимодействия в невалентно связанных системах. Исследовано влияние использования усеченного мультипольного разложения для электростатического вклада на точность восстановления суммарной энергии межмолекулярного связывания. На основании полученных результатов предложен полноценный новый метод восстановления всех вкладов в межмолекулярную энергию связывания. В дополнение, ввиду несовершенства существующих и доступных алгоритмов генерации межатомных поверхностей, была разработана и реализована новая методика их построения и получения для них интегральных значений различных величин.

**Основное содержание работы** отражено в 4 публикациях в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК.

Диссертация «Анализ прочности топологического связывания как метод оценки вкладов в энергию взаимодействия квантовых атомов» Анисимова

А.А. полностью соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года №842 и приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 10 ноября 2017 года №1093 в действующей редакции, предъявляемых к диссертационным работам на соискание **ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – «Физическая химия».** Заключение принято на заседании коллоквиума лаборатории рентгеноструктурных исследований №201 при участии трех членов диссертационного совета от «06» декабря 2023 года.

**На заседании присутствовало 18 человек:** д.х.н. Корлюков А.А., к.ф-м.н. Супоницкий К.Ю., к.х.н. Вологжанина А.В., к.х.н. Федянин И.В., к.х.н. Ананьев И.В., к.х.н. Смольяков А.Ф., к.х.н. Голубь А.С., к.х.н. Антонов Д.Ю., к.х.н. Шаповалов А.В., к.х.н. Головешкин А.С., к.ф-м.н. Сташ А.И., к.ф-м.н. Медведев М.Г., к.х.н. Володин А.Д., м.н.с. Карноухова В.А., ст.лаб. Буйкин П.А., д.х.н. Белкова Н.В. (член диссертационного совета), д.х.н. Шубина Е.С. (член диссертационного совета), д.х.н. Фёдорова О.А. (член диссертационного совета).

**Результаты голосования:** «за» – 18 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел.

Председатель коллоквиума

к.х.н. Вологжанина А.В.

Секретарь коллоквиума

к.х.н. Володин А.Д.

*Подписи к.х.н. Вологжаниной А.В., к.х.н. Володина А.Д.  
заверены.*

*Ученый секретарь ИМЭО РАН  
к.х.н. Туляков Е.Н.*

