

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.161.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ  
ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ИМ. А.Н.НЕСМЕЯНОВА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 27 февраля 2024 №5

О присуждении Анисимову Алексею Альбертовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Анализ прочности топологического связывания как метод оценки вкладов в энергию взаимодействия квантовых атомов» по специальности 1.4.4. (физическая химия) принята к защите 22 декабря 2023 года (протокол заседания №33) диссертационным советом 24.1.161.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук, 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр.1, Приказ о создании совета №105/НК от 11.04.2012 г.

Соискатель Анисимов Алексей Альбертович, «29» октября 1998 года рождения, в 2021 году соискатель окончил с отличием Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» г. Москва по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия», работает в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук в должности младшего научного сотрудника.

Диссертация выполнена в Лаборатории рентгеноструктурных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук.

Научный руководитель – кандидат химических наук, Ананьев Иван Вячеславович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук, Лаборатория рентгеноструктурных исследований, старший научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Хренова Мария Григорьевна, доктор физико-математических наук, профессор РАН, профессор кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

Файзуллин Роберт Рустемович, кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории дифракционных методов исследований Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» — **дали положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (г. Москва) в своем положительном отзыве, подписанном Терентьевым Александром Олеговичем, доктором химических наук, членом-корреспондентом РАН, исполняющим обязанности директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, (заключение составлено Свитанько Игорем Валентиновичем, доктором

химических наук, заведующим Лабораторией молекулярного моделирования и направленного синтеза) указала, что диссертационная работа Анисимова Алексея Альбертовича полностью соответствует требованиям ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, установленным в п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года (в действующей редакции), а ее автор, Анисимов Алексей Альбертович, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия. Работа Анисимова А.А. может быть рекомендована к ознакомлению и использованию следующим научным и научно-образовательным учреждениям: химический и физический факультеты МГУ, ИНЭОС РАН, ИОХ РАН, ИМХ РАН, ИФХЭ РАН, ИОНХ РАН, ФИЦ ПХФ и МХ РАН, МТЦ СО РАН, РХТУ и ИК РАН.

**Соискатель** имеет 30 опубликованных работ, индексируемых в международных базах данных (*Scopus, Web of Science*), в том числе по теме диссертации опубликовано 4 работы, из них в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК, опубликовано 4 работы. Работы по теме диссертации включают 2 статьи в журналах 1 квартиля. Диссертационное исследование представлено на 4 конференциях. Опубликованные работы полностью отражают основные положения диссертационного исследования, в диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Основные работы:

- 1) Anisimov A.A. Interatomic exchange-correlation interaction energy from a measure of quantum theory of atoms in molecules topological bonding: A diatomic case / Anisimov A.A., Ananyev I.V. // *Journal of Computational Chemistry* – 2020. – Vol. 41 – № 25 – P.2213–2222.
- 2) Анисимов А.А. Энергетическое рассмотрение плотности молекулярных кристаллов: взаимосвязь энергии межмолекулярного взаимодействия и

изменения объема молекулы / Анисимов А.А., Ананьев И.В. // Известия Академии наук. Серия химическая – 2021. – Т. 70 – № 8 – С.1429–1437.

3) Anisimov A.A. On the relationship between the strength of bonding between topological atoms and the exchange-correlation energy / Anisimov A.A., Ananyev I.V. // International Journal of Quantum Chemistry – 2023. – Vol. 123 – № 9 – P.e27082.

4) Anisimov A.A. Electron density-based protocol to recover the interacting quantum atoms components of intermolecular binding energy / Anisimov A.A., Ananyev I.V. // The Journal of Chemical Physics – 2023. – Vol. 159 – № 12 – P.124113.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от: 1. **Левиной Е.О.**, к.ф.-м.н., научного сотрудника Лаборатории квантовой химии ФГБУН ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН; 2. **Лысенко К.А.**, д.х.н., профессора кафедры физической химии Химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

Все отзывы положительные. В отзывах указывается, что диссертационная работа Анисимова А.А. выполнена по актуальной тематике, обладает высокой практической значимостью и научной новизной. Отдельно отмечено, что автор в работе не просто добавил свои собственные примеры успешного использования теории «Атомы в Молекулах» и подхода взаимодействующих квантовых атомов (IQA), но выявил закономерности, связывающие топологию электронной плотности с различными вкладами в энергию межатомных взаимодействий. На основании этих закономерностей был разработан полноценный и эффективный подход к восстановлению всех вкладов в энергию межмолекулярных невалентных взаимодействий. Учитывая трудоемкость расчетов в рамках IQA, полученный Алексеем Альбертовичем подход, несомненно, являются важным вкладом в области методов компьютерного моделирования и физической химии. Автор работы заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия (химические науки).

В отзывах содержатся следующие замечания критического характера:

- 1) При изложении отсутствует обсуждение согласованности размерностей параметрической модели и обменно-корреляционного вклада в энергию межатомного взаимодействия;
- 2) В достаточно большом количестве разделов автор не всегда точно ограничивает область применения предлагаемых подходов. Было бы желательно, чтобы в дальнейшем автор больше уделял внимание не качественным, а численным критериям.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации** обосновывается тем, что д.ф.-м.н. Хренова М.Г., к.х.н. Файзуллин Р.Р., и сотрудники Лаборатории молекулярного моделирования и направленного синтеза Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук являются крупными специалистами в области физической химии и, в частности, вычислительной квантовой химии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

**Предложена** и физически обоснована метрика прочности топологического связывания, основанная на интеграле электронной плотности по межатомной поверхности нулевого потока электронной плотности; **продемонстрирована** связь предложенной метрики с явлением (де)локализации электронов внутри атомных бассейнов; **выявлена** качественная зависимость между предложенной метрикой и энергией квантовых обменно-корреляционных эффектов; **введена** параметрическая модель, позволяющая с высокой точностью восстанавливать обменно-корреляционную компоненту межатомной энергии в случае двухатомных систем, а также обменно-корреляционную компоненту и энергию деформации в случае межмолекулярных энергий взаимодействия для невалентно связанных систем; **проведен** анализ влияния использования усеченного мультипольного разложения для электростатического вклада на точность восстановления

суммарной энергии межмолекулярного связывания; на основании комбинации параметрической модели и усеченного мультипольного разложения **разработан** оригинальный подход к получению всех компонент энергии межмолекулярного взаимодействия.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:** в предложенной работе **изучена** взаимосвязь между перераспределением электронного заряда в атомном бассейне и изменениями на поверхности нулевого потока электронной плотности при образовании топологического связывания; **представлена** зависимость между интегралом электронной плотности по межатомной поверхности и межатомной обменно-корреляционной энергией; **проведен** анализ существующих подходов к получению межатомных поверхностей нулевого потока и выявлены их ограничения.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики** подтверждается тем, что: **разработанный** новый метод получения всех вкладов в энергию связывания для невалентных взаимодействий, основанный на комбинации параметрической модели и мультипольного разложения предоставляет существенно более быструю, эффективную и менее ресурсозатратную альтернативу распространенному подходу. **Взаимодействующие квантовые атомы; реализован** новый алгоритм генерации поверхностей нулевого потока электронной плотности, сохраняющий свою работоспособность даже в случае крайне слабых невалентных взаимодействий, что позволяет существенно увеличить точность численного интегрирования различных свойств по данным поверхностям.

**Оценка достоверности результатов исследования** выявила:

**Теория** построена на известных, проверяемых фактах, основанных на методах теории операторов в Гильбертовом пространстве, и соответствует современным представлениям в научной литературе по теме диссертации;

**идея базируется** на анализе большого числа публикаций, посвященных моделям «химической связи» в квантовой химии и методам установления прочности межатомных и межмолекулярных взаимодействий, который был проведен в литературном обзоре; **использованы** известные подходы и методы статистической обработки и анализа полученных расчётных данных, которые соответствуют решаемым задачам: верификация работоспособности полученной параметрической модели производилась на дополнительном тестовом наборе систем, точность разработанного алгоритма получения поверхностных интегралов косвенно подтверждается результатами, продуцируемыми другой программой, выполняющей роль «внешнего стандарта»; **установлено** качественное соответствие результатов автора с данными, приведенными в независимых источниках по данной теме.

**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 статей.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие вопросы и критические замечания:

1. Связана ли средняя абсолютная ошибка, наблюдаемая для представленного Вами метода, с величиной  $kT$ ? Насколько корректно оперировать значениями энергий порядка десятых и сотых ккал/моль при оценке взаимодействий, если у вас значимый порядок ошибки в одну ккал/моль?
2. Каковы границы применимости предлагаемого Вами метода для изучения межмолекулярных взаимодействий?
3. Чем определяется рассматриваемая Вами делокализация в реальном пространстве и каков ее физический смысл? Что имеется в виду – перераспределение зарядов или перераспределение орбиталей?

4. Что Вы привнесли своей работой в развитие метода «Атомы в Молекулах»?
5. Годится ли Ваш метод для комплексов переходных металлов?
6. Есть ли какие-то идеи по поводу расширения применимости предлагаемого подхода на ковалентные взаимодействия?

Соискатель Анисимов А.А. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию:

1. Средняя абсолютная ошибка в 1.12 ккал/моль, которая была представлена при восстановлении общей энергии связывания для невалентных взаимодействий, не связана напрямую с кТ, однако, действительно, правильнее было бы указывать значение ошибки с точностью до целых, из-за влияния величины кТ.
2. Для невалентных межмолекулярных взаимодействий предлагаемая зависимость работает не только для оптимальных ядерных геометрий, но и в некотором интервале деформированных конфигураций ядер. Границы применимости разработанного метода в случае восстановления энергии деформации ограничивается явлением переноса заряда – оно не должно превышать 0.1 электрона; в случае восстановления обменно-корреляционной энергии верхней границей является значение делокализационного индекса равное 0.5, что было выяснено путем уменьшения расстояния между центрами масс двух молекул и наблюдением за сохранением работоспособности предлагаемой зависимости.
3. В данном случае рассматривается распределение электронной плотности. Под общим термином делокализация подразумевается возникновение скоррелированности движения пар электронов при образовании связывания, которая может быть получена посредством анализа матрицы плотности второго порядка.
4. С точки зрения теоретической значимости было показано, что метрика топологического связывания – поверхностный интеграл, связана с



обменно-корреляционными эффектами; с точки зрения практического применения предлагаемая методика значительно превосходит в точности распространенный подход Моллинса-Лекомта-Эспинозы к оценке энергии невалентных взаимодействий.

5. Предлагаемый метод должен работать для невалентных взаимодействий в комплексах переходных металлов, это было дополнительно проверено на бимолекулярных ассоциатах, в случае кластеров работоспособность также должна сохраняться, поскольку эти системы находятся в рамках озвученных границ применимости подхода.
6. Планируется рассмотреть изменения на оставшихся поверхностях, помимо той, что отвечает интересующему нас связывающему взаимодействию, сравнив их для несвязанных фрагментов и связанного комплекса.

На заседании 27 февраля 2024 г. диссертационный совет принял решение за разработки в области методов компьютерного моделирования электронной структуры молекул и кристаллов, вносящих значительный вклад в развитие физической и квантовой химии, присудить Анисимову А.А. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 21 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия, участвовавших в заседании, из 28 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту – 0 человек, проголосовали: за – 21, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Заместитель председателя  
диссертационного совета 24.1.161.01  
д.х.н.



Любимов Сергей Евгеньевич  
*Любимов*

Ученый секретарь  
диссертационного совета 24.1.161.01  
к.х.н.

*Ольшеская*  
Ольшеская Валентина Антоновна

27 февраля 2024 г.