Заключение диссертационного совета ИОНХ РАН 01.4.004.093
по диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук
Решение диссертационного совета от «25» сентября 2025 г. № 93.16
о присуждении Вологжаниной Анне Владимировне, гражданке РФ,
ученой степени доктора химических наук.

Диссертация «Топологический анализ как универсальный подход для изучения молекул в кристаллическом поле: от молекулярных органических соединений до ассоциатов с биомакромолекулами» по специальности 1.4.4 Физическая химия принята к защите диссертационным советом «11» июня 2025 г., протокол № 93.14.

Соискатель Вологжанина Анна Владимировна, 1981 года рождения, окончила химический факультет Самарского государственного университета в 2003 году по специальности химия. В 2006 г. Вологжанина А.В. защитила диссертацию «Анализ влияния природы координированных атомов на стереохимию лантанидов с помощью полиэдров Вороного-Дирихле» на соискание степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 – неорганическая химия на диссертационном совете Самарского государственного университета. В настоящее время соискатель работает в лаборатории рентгеноструктурных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова Российской академии наук» в должности старшего научного сотрудника.

Диссертация выполнена в лаборатории рентгеноструктурных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова Российской академии наук».

Официальные оппоненты:

академик РАН Горбунова Юлия Германовна, доктор химических наук,

профессор, главный научный сотрудник лаборатории координационной химии щелочных и редких металлов Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН);

доктор химических наук Барташевич Екатерина Владимировна, профессор, ведущий научный сотрудник НИЛ «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов» Южно-Уральского государственного университета (ЮУрГУ);

доктор химических наук Фукин Георгий Константинович, профессор РАН, ведущий научный сотрудник группы рентгенодифракционных исследований Института металлорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук (ИМХ РАН)

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (НГУ) в своем положительном заключении, подписанном доктором химических наук, доцентом, зав. кафедрой Химии твердого тела Факультета естественных наук Захаровым Борисом Александровичем, доктором химических наук, профессором, профессор кафедры Химии твердого тела Факультета естественных наук Болдыревой Еленой Владимировной, доктором химических наук, старшим преподавателем кафедры Химии твердого тела Факультета естественных наук Сереткиным Юрием Владимировичем, указала, что диссертация по совокупности объема выполненных исследований, обоснованности, новизны и значимости полученных результатов и выводов соответствует паспорту специальности 1.4.4 Физическая химия, отвечает критериям пп. 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней в редакции Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 с изменениями от 21 апреля 2016 г. № 335 и пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Федеральном

государственном бюджетном учреждении науки Институте общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук от 29 марта 2024, а ее автор достоин присуждения искомой степени.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации был продиктован профилем их специализации, близкой к тематике диссертации, наличием публикаций в рецензируемых научных изданиях по теме диссертации, а также возможностью дать объективную оценку всех аспектов диссертационной работы.

На автореферат поступило **8** отзывов от следующих организаций:

1. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (Кукушкин Вадим Юрьевич, д.х.н., профессор кафедры физической органической химии, академик РАН; Бокач Надежда Арсеньевна, д.х.н., профессор РАН, профессор кафедры физической органической химии);
2. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» (Асланов Леонид Александрович, д.х.н., профессор кафедры общей химии Химического факультета);
3. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева" (Цирельсон Владимир Григорьевич, д.х.н., заведующий кафедрой Квантовой химии, профессор);
4. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук"(Ферштат Леонид Леонидович, д.х.н., заведующий лабораторией азотсодержащих соединений)

5. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Обособленное структурное подразделение ФГБУН "Федеральный исследовательский центр "Казанский научный центр РАН" (Катаева Ольга Николаевна, д.х.н., главный научный сотрудник)
6. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук" Самарский филиал. (Шевченко Александр Петрович, д.х.н., старший научный сотрудник)
7. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук" (Кучеренко Александр Сергеевич, д.х.н., ведущий научный сотрудник)
8. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Пушкин Денис Валерьевич, д.х.н., зав. кафедрой неорганической химии; Савченков Антон Владимирович, д.х.н. профессор кафедры неорганической химии)

Все отзывы имеют положительный характер. В поступивших отзывах отмечены новизна, актуальность, теоретическая и практическая значимость полученных результатов диссертационной работы. Вопросы и замечания носят частный и дискуссионный характер и не влияют на общую высокую оценку диссертационной работы, а также на ее соответствие критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени доктора наук.

Соискатель имеет 342 опубликованных работы, индексируемых в базе данных Scopus. По тематике работы опубликовано 32 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень утвержденных Ученым советом ИОНХ РАН изданий.

Статьи:

1. Korlyukov A.A. Bis(μ_2-2-(dimethylamino)ethoxo-N,O,O)-di(phenolato-O)ditin(II): a high-resolution single-crystal X-ray diffraction and quantum chemical study / Korlyukov A.A., Khrustalev V.N., **Vologzhanina A.V.**, Lyssenko K.A., Nechaev M.S., Antipin M.Yu. // Acta Crystallographica Section B. – 2011. – V. 67, N 4. – P. 315-323. DOI: 10.1107/S0108768111022695
2. Serezhkin V.N. Voronoi-Dirichlet tesselation as a tool for investigation of polymorphism in molecular crystals with $C_wH_xN_yO_z$ composition and photochromic properties / Serezhkin V.N., Serezhkina L.B., **Vologzhanina A.V.** // Acta Crystallographica Section B. – 2012. – V. 68, N 3. – P. 305-312. DOI: 10.1107/S0108768112014711
3. Vologzhanina A.V. Theoretical QTAIM, ELI-D, and Hirshfeld surface analysis of the Cu–(H)B Interaction in $[Cu_2(bipy)_2B_{10}H_{10}]$ / **Vologzhanina A.V.**, Korlyukov A.A., Avdeeva V.V., Polyakova I.N., Malinina E.A., Kuznetsov N.T. // The Journal of Physical Chemistry A. – 2013. – V. 117. – P. 13138-13150. DOI: 10.1021/jp405270u
4. Вологжанина А.В. Межатомные взаимодействия в структуре $(C_4H_{11}N_2)_2(C_4H_{12}N_2)[Mo(CN)_8]$: сравнение двух методологий / **Вологжанина А.В.**, Лысенко К.А. // Известия Академии Наук. Серия химическая. – 2013. – Т. 62, N 8. – С. 1786-1792.
5. Lyssenko K.A. A comparative study of a mixed-ligand copper(II) complex by the theory of atoms in molecules and the Voronoi tessellation / Lyssenko K.A., **Vologzhanina A.V.**, Torubaev Y.V., Nelyubina Y.V. // Mendeleev Communications. – 2014. – V. 24, N 4. – P. 216-218. DOI: 10.1016/j.mencom.2014.06.009
6. Vologzhanina A.V. Electronic Structure of Cesium Butyratouranylate(VI) as Derived from DFT-assisted Powder X-ray Diffraction Data / **Vologzhanina A.V.**, Savchenkov A.V., Dmitrienko A.O., Korlyukov A.A., Bushmarinov I.S., Pushkin D.V., Serezhkina L.B. // The Journal of Physical Chemistry A. – 2014. – V. 118, N 41. – P. 9745-9752. DOI: 10.1021/jp507386j
7. Dolganov A.V. First iron and cobalt(II) hexabromoclathrochelates: structural, magnetic, redox, and electrocatalytic behavior / Dolganov A.V., Belov A.S., Novikov V.V., **Vologzhanina A.V.**, Romanenko G.V., Budnikova Yu.G., Zelinskii G.E., Buzin M.I., Voloshin Y.Z. // Dalton Transactions. – 2014. – V. 43, N 48. – P. 17934-17948. DOI: 10.1039/C4DT03082F
8. Vologzhanina A.V. Synthesis and Temperature-Induced Structural Phase and Spin Transitions in Hexadecylboron-Capped Cobalt(II) Hexachloroclathrochelate and Its Diamagnetic Iron(II)-Encapsulating Analogue / **Vologzhanina A.V.**, Belov A.S., Novikov V.V., Dolganov A.V., Romanenko G.V., Ovcharenko V.I., Korlyukov A.A., Buzin M.I., Voloshin Y.Z. // Inorganic Chemistry. – 2015. – V. 54, N 12. – P. 5827-5838. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b00546

9. Savchenkov A.V. Trinuclear $\{Sr[UO_2L_3]_2(H_2O)_4\}$ and pentanuclear $\{Sr[UO_2L_3]_4\}^{2-}$ uranyl monocarboxylate complexes (L-acetate or n-butyrate ion) / Savchenkov A.V., Klepov V.V., **Vologzhanina A.V.**, Serezhkina L.B., Pushkin D.V., Serezhkin V.N. // CrystEngComm. – 2015. – V. 17, N 4. – P. 740-746. DOI: 10.1039/C4CE02103G
10. Vologzhanina A.V. Combined analysis of chemical bonding in a Cu^{II} dimer using QTAIM, Voronoi tessellation and Hirshfeld surface approaches / **Vologzhanina A.V.**, Kats S.V., Penkova L.V., Pavlenko V.A., Efimov N.N., Minin V.V., Eremenko I.L. // Acta Crystallographica Section B. – 2015. – V. 71, N 5. – P. 543-554. DOI: 10.1107/S2052520615015279
11. Voronova E.D. Theoretical Charge Density Analysis and Nonlinear Optical Properties of Quasi-Planar 1-Aryl(hetaryl)-5-phenylpent-1-en-4-yn-3-ones / Voronova E.D., Golovanov A.A., Suponitsky K.Yu., Fedyanin I.V., **Vologzhanina A.V.** // Crystal Growth & Design. – 2016. – V. 16, N 7. – P. 3859-3868. DOI: 10.1021/acs.cgd.6b00423
12. Smol'yakov A.F. Studies of Multicenter and Intermolecular Dihydrogen B-H…H-C Bonding in [4,8,8-exo-$\{PPh_3Cu\}$-4,8,8-$(H)_3$-*commo*-3,3-Co(1,2-$C_2B_9H_9$)(1,2-$C_2B_9H_{10}$)] / Smol'yakov A.F., Korlyukov A.A., Dolgushin F.M., Balagurova E.V., Chizhevsky I.T., **Vologzhanina A.V.** // European Journal of Inorganic Chemistry. – 2016. – V. 2016, N 36. – P. 5847-5855. DOI: 10.1002/ejic.201501029
13. Korlyukov A.A. Understanding the structure of salicyl hydrazone metallocomplexes: crystal structure, AIM and Hirshfeld surface analysis of trichloro-(N-salicylidenebenzoylhydrazinato-N,O,O′)-tin(IV) / Korlyukov A.A., Shmatkova N.V., Seifullina I.I., **Vologzhanina A.V.** // Structural Chemistry. – 2016. – V. 27, N 1. – P. 25-36. DOI: 10.1007/s11224-015-0612-x
14. Kravchenko E.A. Secondary interactions in decachloro-*closo*-decaborates $R_2[B_{10}Cl_{10}]$ (R = Et_3NH^+, Ph_4P^+, and $[Ag(NH_3)_2]^+$): ^{35}Cl NQR, PW-DFT, and X-ray studies / Kravchenko E.A., Gippius A.A., Korlyukov A.A., **Vologzhanina A.V.**, Avdeeva V.V., Malinina E.A., Ulitin E.O., Kuznetsov N.T. // Inorganica Chimica Acta. – 2016. – V. 447. – P. 22-31. DOI: 10.1016/j.ica.2016.03.025
15. Avdeeva V.V. Solid-State Reactions of Eicosaborate $[B_{20}H_{18}]^{2-}$ Salts and complexes / Avdeeva V.V., Buzin M.I., Dmitrienko A.O., Dorovatovskii P.V., Malinina E.A., Kuznetsov N.T., Voronova E.D., Zubavichus Y.V., **Vologzhanina A.V.** // Chemistry – A European Journal. – 2017. – V. 23, N 26. – P. 16819-16828. DOI: 10.1002/chem.201703285
16. Вологжанина А.В. Исследование межмолекулярных взаимодействий в кристаллах фоточувствительных координационных соединений цинка(II) / **Вологжанина А.В.,** Зорина-Тихонова Е.Н., Чистяков А.С., Сидоров А.А., Корлюков А.А., Еременко И.Л. // Координационная химия. – 2018. – Т. 44, N 6. – С. 371-375. DOI: 10.1134/S0132344X18050110
17. Volodin A.D. Diastereoselective solid-state crossed photocycloaddition of olefins in a 3D Zn(II) coordination polymer / Volodin A.D., Korlyukov A.A.,

Zorina-Tikhonova E.N., Chistyakov A.S., Sidorov A.A., Eremenko I.L., **Vologzhanina A.V.** // Chemical Communications. – 2018. – V. 54, N 98. – P. 13861-13864. DOI: 10.1039/C8CC07734G
18. Vologzhanina A.V. Solid-State Photoinitiated Cycloaddition Reaction of 4,4 '-(Ethene-1,2-diyl)bis(pyridinium) Dinitrate: Charge-Density Perspective on Initial Stage of the Reaction / **Vologzhanina A.V.**, Aleshin D.Y., Volodin A.D., Savchenkov A.V., Ushakov I.E., Korlyukov A.A. // Crystals. – 2019. – V. 9, N 12. – Article 613. DOI: 10.3390/cryst9120613
19. Korlyukov A.A. Charge density view on bicalutamide molecular interactions in the monoclinic polymorph and androgen receptor binding pocket / Korlyukov A.A., Malinska M, **Vologzhanina A.V.**, Goizman M.S., Trzybinski D., Wozniak K. // IUCrJ. – 2020. – V. 7, N 1. – P. 71-82. DOI: 10.1107/S2052252519014416
20. Astakhov G.S. Coordination Affinity of Cu(II)-Based Silsesquioxanes toward N,N-Ligands and Associated Skeletal Rearrangements: Cage and Ionic Products Exhibiting a High Catalytic Activity in Oxidation Reactions / Astakhov G.S., Bilyachenko A.N., Levitsky M.M., Shul'pina L.S., Korlyukov A.A., Zubavichus Y.V., Khrustalev V.N., **Vologzhanina A.V.**, Shubina E.S., Dorovatovskii P.V., Shul'pin G.B. // Inorganic Chemistry. – 2020. – V. 59, N 7. – P. 4536-4545. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b03680
21. Avdeeva V.V. Silver(I) and Copper(I) Complexation with Decachloro-Closo-Decaborate Anion / Avdeeva V.V., Buzanov G.A., Malinina E.A., Kuznetsov N.T., **Vologzhanina A.V.** // Crystals. – 2020. – V. 10, N 5. – Article 389. DOI: 10.3390/cryst10050389
22. Vologzhanina A.V. Peculiarities of Br…Br bonding in crystal structures of polybromides and bromine solvates / **Vologzhanina A.V.**, Buikin P.A., Korlyukov A.A. // CrystEngCommun. – 2020. – V. 22, N 43. – P. 7361-7370. DOI: 10.1039/D0CE00288G
23. Goloveshkin A.S. Novel Polymorph of Favipiravir—An Antiviral Medication / Goloveshkin A.S., Korlyukov A.A., **Vologzhanina A.V.** // Pharmaceutics. – 2021. – V. 13, N 2. – Article 139. DOI: 10.3390/pharmaceutics13020139
24. Vologzhanina A.V. Intermolecular Interactions in Crystal Structures of Imatinib-Containing Compounds / **Vologzhanina A.V.**, Ushakov I.E., Korlyukov A.A. // International Journal of Molecular Sciences. – 2020. – V. 21, N 23. – Article 8970. DOI: 10.3390/ijms21238970
25. Korlyukov A.A. Charge density analysis of abiraterone acetate / Korlyukov A.A., **Vologzhanina A.V.**, Trzybinski D., Malinska M., Wozniak K. // Acta Crystallographica Section B. – 2020. – V. 76, N 6. – P. 1018–1026. DOI: 10.1107/S2052520620013244
26. Брель В.К. Исследование экстракционных и координационных свойств 2,3-бис(дифенилфосфинил)бута-1,3-диена и 3,4-бис(дифенилфосфинил)-2,5-диметилгекса-2,4-диена / Брель В.К., Артюшин О.И., Моргалюк В.П., **Вологжанина А.В.**, Туранов А.Н., Карандашев В.К. // Координационная химия. – 2022. – Т. 48, N 4. – С. 206–214. DOI: 10.31857/S0132344X22040016

27. Limarev I.P. Monoribbed-functionalized iron(II) cage complexes decorated with terminal reactive and vector groups: synthetic strategy towards, chemical transformations and structural characterization / Limarev I.P., Zelinskii G.E., Belova S.A., Dorovatovskii P.V., **Vologzhanina A.V.**, Lebed E.G., Voloshin Y.Z. // Chinese Journal of Chemistry. – 2022. – V. 40, N 17. – P. 2089–2105. DOI: 10.1002/cjoc.202200191
28. Бондарева Н.А. Синтез, строение и распределение электронной плотности в кристаллах $K_2(L\text{-}Trp)_2(H_2O)$ (HTrp = триптофан) / Бондарева Н.А., Пурыгин П.П., Зарубин Ю.П., Дороватовский П.В., Корлюков А.А., **Вологжанина А.В.** // Координационная химия. – 2023. – Т. 49, N 5. – С. 269-277. DOI: 10.31857/S0132344X2260031X
29. Zorina-Tikhonova E.N. Design and synthesis of copper (II) malonates with N, N′-containing linkers / Zorina-Tikhonova E.N., Chistyakov A.S., Novikova V.A., Knyazev D.A., Gogoleva N.V., Blinou D.O., Efimov N.N., Dorovatovskii P.V., Kiskin M.A., Eremenko I.L., **Vologzhanina A.V.** // CrystEngComm. – 2023. – V. 25, N 19. – P. 2859-2870. DOI: 10.1039/D3CE00081H
30. Korlyukov A.A. Synthesis, NoSpherA2 refinement and Non-Covalent Bonding of Abiraterone Bromide Monohydrate / Korlyukov A.A., Buikin P.A., Dorovatovskii P.V., **Vologzhanina A.V.** // Structural Chemistry. – 2023. – V. 34, N 5. – P. 1927-1934. DOI: 10.1007/s11224-023-02210-3
31. Korlyukov A.A. Ligand-Receptor Interactions of Lamivudine: A View from Charge Density Study and QM/MM Calculations / Korlyukov A.A., Stash A.I., Romanenko A.R., Trzybinski D., Wozniak K., **Vologzhanina A.V.** // *Biomedicines.* –2023. – V.11, – N.3. – Article 743. DOI: 10.3390/biomedicines11030743
32. Vologzhanina A.V. Atomic and molecular volumes from three crystal tessellations: a comparison of the QTAIM, Hirshfeld, and Voronoi data / **Vologzhanina A.V.** // Structural Chemistry. – 2025. – V. 36, N 1. – P. 113-123. DOI: 10.1007/s11224-024-02426-x

Общее число цитирований публикаций соискателя согласно базам данных Web of Science 4264, Scopus 4326, РИНЦ (ядро) 4940. Число цитирований публикаций по теме диссертации, согласно базе данных РИНЦ 552.

Диссертационный совет отмечает, что в результате выполненных соискателем исследований:

1. Разработан новый комплексный подход к разбиению кристаллического пространства на области действия атомов и молекул, позволяющий выявить взаимное соответствие в описании

химического связывания и области действия структурной единицы различными методами кристаллохимического анализа. Метод подходит для изучения широкого круга органических, элементоорганических и координационных соединений, перспективных в качестве использования в функциональных материалах и фармацевтических препаратах.

2. Подтверждено, что стереоатомная модель строения кристаллических веществ и теория Р. Бейдера «Атомы в молекулах» совпадают в выявлении вынужденных контактов, что позволило предложить критерии, позволяющие выявить большинство координационных, водородных и галогенных связей, связей металл–металл, агостических и диводородных взаимодействий, в случае которых наблюдается образование связывающей критической точки, в рамках стереоатомной модели.
3. Показано, что результаты оценки молекулярного координационного числа (МКЧ), полученные с использованием стереоатомной модели и теории «Атомы в молекулах» совпадают в большинстве случаев и для мономолекулярных соединений, как правило, значение МКЧ равно 14.
4. Выявлено, что объем атома (иона) металла, установленный с помощью стереоатомной модели или поверхности Хиршфельда, прямо пропорционален объему атомного бассейна.
5. Установлено, что результаты использования всех трёх методов разбиения подтверждают постоянство объема многоатомных структурных единиц в кристаллическом поле, причем объем, вычисленный приближенными методами, отличается от объема молекулярного бассейна в среднем не более чем на 5%.
6. Показано наличие линейной корреляции между энергией координационных связей и площадью соответствующей межатомной поверхности и отсутствие таковой для межмолекулярных взаимодействий.
7. Установлено, что результаты использования стереоатомной модели и разбиения Хиршфельда в целом хорошо согласуются друг с другом в оценке парциального вклада различных типов межмолекулярных

взаимодействий в площадь молекулярной поверхности, однако не согласуются с результатами оценки вклада отдельных взаимодействий в суммарную энергию межмолекулярных взаимодействий.

8. Показано, что гомомолекулярные изоструктурные соединения, кристаллическая упаковка которых образована ненаправленными взаимодействиями, характеризуются различным набором межмолекулярных взаимодействий при постоянстве молекулярного координационного числа.
9. Предложен способ анализа многоцентровых координационных взаимодействий в комплексах с полиэдрическими анионами бора с использованием атомных поверхностей Хиршфельда, позволяющий разделить двух- и трехцентровые взаимодействия и визуально сравнить прочность координационных связей.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в обнаруженных при сравнительном анализе трех методов ограничениях и новых применениях атомных и молекулярных полиэдров Вороного-Дирихле и поверхностей Хиршфельда. Предложенный подход может быть далее расширен на другие дескрипторы атомов, химических связей и кристаллических веществ, а также другие методы кристаллохимического анализа, помимо описанных в диссертационной работе. Обнаружена высокая корреляция между парциальными вкладами различных типов взаимодействий в молекулярную поверхность, оцененными с помощью полиэдров Вороного-Дирихле и поверхностей Хиршфельда, а также объемом многоатомных фрагментов, установленным с помощью теории «Атомы в молекулах», разбиения Вороного-Дирихле и применения поверхностей Хиршфельда.

Установлено, что грани полиэдров Вороного-Дирихле с существенно ненулевыми телесными углами могут быть использованы для поиска новых типов связывающих межмолекулярных взаимодействий. Было показано,

что разбиение Вороного-Дирихле может быть использовано для поиска соединений с галогенной проводимостью и фоточувствительных соединений. Было предложено использовать данный подход для анализа конформационных изменений в структуре соединений, претерпевающих фазовые переходы при изменении внешних условий или в различном молекулярном окружении (в кристаллосольватах, солях, сокристаллах и комплексах с белками).

Впервые было предложено использовать атомные поверхности Хиршфельда для изучения особенностей связывания атомов-комплексообразователей с полиэдрическими боранами. Установлено, что данный метод чувствителен к типу химического взаимодействия (двух- или многоцентровое), типу связывания (через вершину, грань или ребро полиэдрического аниона) и прочности взаимодействия.

Достоверность полученных результатов определяется использованием современного научного оборудования, корреляцией расчётных и экспериментальных результатов, публикациями в рецензируемых изданиях, а также широкой апробацией на научных конференциях.

Личный вклад автора состоял в выборе темы исследования и постановке задач научного поиска, разработке методики исследования, анализе и обобщении экспериментальных данных. Все основные результаты получены при непосредственном участии автора или под его руководством. В работах, выполненных в соавторстве, автор непосредственно участвовал на всех этапах постановки задач, проведения экспериментов, обсуждения и публикации полученных результатов.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия в частях: 1 «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений»; 10 «Создание и разработка

методов компьютерного строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.»; 11 «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среди и белковом окружении.».

Диссертационный совет пришел к выводу, что диссертация Вологжаниной Анны Владимировны на соискание ученой степени доктора химических наук является научно-квалификационной работой, в которой решена важная научная проблема современной физической химии по разработке нового комплексного подхода в описании химического связывания и области действия структурной единицы, заключающийся в сравнении эквивалентных дескрипторов атомов и химических связей, полученных различными методами кристаллохимического анализа, основанными на разбиении кристаллического пространства. Данный подход позволяет выявить сходства и различия между методами в описании межатомных взаимодействий, координационных чисел, атомных и молекулярных объемов для широкого круга соединений, что позволяет расширить границы их применимости для поиска взаимосвязей между строением и свойствами кристаллических соединений.

В диссертации Вологжаниной Анны Владимировны соблюдены установленные пп. 9–14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции) и пп.

2.1–2.5 «Положения о порядке присуждения ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук» от 29 марта 2024 г. критерии, которым должна соответствовать диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук, а ее автор, Вологжанина Анна Владимировна, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки).

На заседании 25 сентября 2025 г. диссертационный совет принял решение присудить Вологжаниной Анне Владимировне ученую степень доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве **13** человек, из них **12** докторов наук, участвовавших в заседании, из **16** человек, входящих в состав совета (дополнительно введены на разовую защиту **0** человек), проголосовали: за - **13**, против - **нет**, недействительных бюллетеней - **нет**. Протокол счетной комиссии № **93.16а**.

Председатель
Академик РАН, д.х.н. Еременко Игорь Леонидович

Ученый секретарь
диссертационного совета, к.х.н. Рюмин Михаил Александрович