«УТВЕРЖДАЮ»

директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей
и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук, чл.-корр. РАН, д.х.н., В.К. Иванов

_____
(подпись)

«22» ____мая____2025 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

секции «Координационная химия»

Учёного совета Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН)

Диссертация «Топологический анализ как универсальный подход для изучения молекул в кристаллическом поле: от молекулярных органических соединений до ассоциатов с биомакромолекулами» выполнена в Лаборатории рентгеноструктурных исследований (№ 201) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН).

В период подготовки диссертации в 2007-2025 гг. соискатель Вологжанина Анна Владимировна работала в Лаборатории рентгеноструктурных исследований ИНЭОС РАН в должности научного сотрудника (апрель 2007 – февраль 2014) и старшего научного сотрудника (март 2014 – по наст. вр.). В 2003 г. Вологжанина А.В. окончила Самарский государственный университет с присуждением квалификации «Химик» по специальности «Химия». В 2006 г. Вологжанина А.В. закончила аспирантуру Самарского государственного университета и защитила кандидатскую диссертацию на тему «Анализ влияния природы

координированных атомов на стереохимию лантанидов с помощью полиэдров Вороного-Дирихле» по специальности 02.00.01 – Неорганическая химия.

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

Оценка выполненной соискателем работы.

Диссертационная работа Вологжаниной Анны Владимировны носит фундаментальный характер с перспективой дальнейшего прикладного применения, посвящена сравнительному анализу дескрипторов химической связи, атомных и молекулярных доменов, получаемых с использованием разбиения Вороного-Дирихле или поверхностей Хиршфельда с одной стороны, и теории «Атомы в молекулах», с другой. В ходе работы в рамках вышеуказанных подходов было проведено сравнение следующих дескрипторов атомов и межатомных взаимодействий в кристаллах (элементо)органических и координационных соединений: информация о связывающих межатомных взаимодействиях;

данные о координационных числах ионов металлов, числе ближайших соседей молекулярных соединений, объеме ионов металлов, неметаллов и многоатомных фрагментов, площади межатомной или межмолекулярной поверхности и энергии соответствующих взаимодействий. Впервые установлена структура ряда соединений, а также на основании прецизионных рентгеноструктурных экспериментов и квантово-химических расчетов получена функция распределения электронной плотности в кристаллах. В экспериментальной части описаны примененные в работе физико-химические методы анализа. На основании полученных результатов был предложен способ конформационного анализа молекул в различном окружении, поиска факторов, влияющих на протекание твердофазных реакции, выявления новых типов нековалентных взаимодействий.

В работе использовался комплексный экспериментально-теоретический подход, который включает низкотемпературные, многотемпературные и прецизионные рентгенодифракционные исследования, квантово-химические расчеты кристаллических соединений в рамках теории функционала плотности, получение и анализ экспериментальной и теоретической функции распределения электронной плотности в рамках теории Р. Бейдера «Атомы в молекулах», анализ новых и ранее опубликованных кристаллических структур в рамках разбиения Вороного-Дирихле и поверхностей Хиршфельда. В рамках работы осуществлен детальный анализ литературных источников, в которых приведен анализ в рамках теории «Атомы в молекулах» координационных и

металлорганических соединений на основании прецизионных рентгенодифракционных данных.

В диссертации Вологжаниной Анны Владимировны «Топологический анализ как универсальный подход для изучения молекул в кристаллическом поле: от молекулярных органических соединений до ассоциатов с биомакромолекулами» поставлены и решены актуальные задачи современной физической химии. Так, показано, что разбиение Вороного-Дирихле может быть использовано для разделения связывающих и несвязывающих (вынужденных) межатомных взаимодействий, объем атома-комплексообразователя, ограниченный полиэдром Вороного-Дирихле или поверхностью Хиршфельда превышает объем соответствующего атомного домена в среднем на 14 или 20 %, причем разница снижается с ростом заряда ядра, а для многоатомных структурных единиц молекулярный объем отличается в среднем на 2 и 5% и остается неизменным в различном окружении и при различной конформации.

Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации.

Выбор темы, постановка задач и целей исследования, обсуждение и обобщение полученных результатов, а также научных положений и выводов, выносимых на защиту, принадлежат диссертанту. Интерпретация результатов структурных и расчетных исследований, топологический и корреляционный анализ атомов, молекул и межмолекулярных взаимодействий выполнены диссертантом лично. Физико-химический анализ синтезированных соединений, квантово-химические расчеты, описанные в диссертации, выполнены в сотрудничестве с коллегами-сотрудниками ИНЭОС РАН, ИОНХ РАН, МГУ, СамГУ, ТГУ.

Степень достоверности результатов проведенных соискателем исследований, их апробация.

Достоверность проведенных исследований обеспечена использованием современного оборудования и программного обеспечения. Информация об особенностях распределения функции электронной плотности в молекулах и кристаллах в ряде случаев подтверждена воспроизводимостью результатов, полученных с помощью прецизионных экспериментальных данных и квантово-химических расчетов. Сделанные выводы основаны на решении и уточнении 78 новых структур, уточнении 12 прецизионных рентгенодифракционных экспериментов, обработке 39 массивов данных о теоретическом

распределении электронной плотности и сравнении в этих соединениях атомных и молекулярных дескрипторов, полученных тремя разными методами кристаллохимического анализа.

Научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, ценность научных работ соискателя.

Автором были впервые получены следующие научные результаты, свидетельствующие о вкладе в развитие современной физической химии и кристаллохимии:

- Результаты сравнительного анализа координационных взаимодействий в почти 200 комплексах s-, p-, d- и f-соединений, 2696 межмолекулярных контактов в структуре органических и координационных соединений в рамках различных методов, который подтвердил, что разбиение Вороного-Дирихле может быть использовано для разделения связывающих и несвязывающих (вынужденных) межатомных взаимодействий.

- Результаты сравнительного анализа атомного и молекулярного объема, получаемых в рамках различных методов кристаллохимического анализа, которые свидетельствуют, что корреляция между объемом иона неметалла в рамках различных методов отсутствует, величина $V_{ВД}$ (объем полиэдра Вороного-Дирихле) или $V_{ПХ}$ (объем, ограниченный поверхностью Хиршфельда) атома-комплексообразователя превышает величину $V_{АМ}$ (объем атомного домена) в среднем на 14 или 20 %, причем разница снижается с ростом заряда ядра, а для многоатомных структурных единиц молекулярный объем $V_{ВД}$ и $V_{ПХ}$ отличается от $V_{АМ}$ в среднем на 2 и 5% и остается неизменным в различном окружении и при различной конформации.

- Результаты сравнительного анализа энергии парных взаимодействий и площади соответствующей межатомной поверхности, которые показали наличие корреляции между ними для 172 координационных связей и отсутствие корреляции для 696 межмолекулярных взаимодействий, соответствие парциального вклада различных типов межмолекулярных взаимодействий в площадь поверхности молекулярного полиэдра Вороного-Дирихле и поверхности Хиршфельда.

- Применение атомных поверхностей Хиршфельда для анализа координационных связей.

- Применение разбиения Вороного-Дирихле для поиска факторов, определяющих фоточувствительность или каталитические свойства в рядах кристаллических соединений, конформацию гибких молекул и стабилизирующих образование полиядерных гетерометаллических комплексов урана.

Ценность научных работ соискателя заключается в разработке нового подхода, позволяющего разделить с помощью разбиения Вороного-Дирихле связывающие и вынужденные межмолекулярные взаимодействия, информации о разнице между молекулярными координационными числами и объемами атомов и молекул, вычисленными в рамках трех методов кристаллохимического анализа. Практическая значимость состоит в выявлении границ применимости стереоатомной модели кристаллических веществ и разработке новых применений разбиений Вороного-Дирихле и поверхностей Хиршфельда. Показано, что с помощью атомных поверхностей Хиршфельда можно выявить двух- и трехцентровые взаимодействия между атомами металла и полиэдрическими соединениями бора. Предложены методы использования разбиения Вороного-Дирихле для анализа твердофазных реакций и корреляционного анализа взаимосвязи между межмолекулярными взаимодействиями и молекулярной конформацией гибких молекул.

Научная специальность, которой соответствует диссертация. Диссертационная работа Вологжаниной Анны Владимировны соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. - «Физическая химия», в пунктах:

П.1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.

П.10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.

П.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 сред и белковом окружении.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем.

Основные научные результаты диссертации представлены в 32 статьях в отечественных и зарубежных рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

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. – No. 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

По докладу Вологжаниной Анны Владимировны были заданы следующие вопросы:

д.х.н. Гавричев К.С.: Каков физический смысл свободного члена в полученных корреляциях между атомными и молекулярными объемами, оцененными в рамках разных приближений?

к.х.н. Шаповалов С.С.: Чем обусловлена разница вида межатомной поверхности в рамках различных приближений? Насколько корректно оценивать объем атомов водорода из данных рентгеноструктурного эксперимента с учетом того, что они не дают информацию о точном положении протонов?

д.х.н. Кузьмина Л.Г.: В каком месте межатомного вектора проходит межатомная граница в рамках разбиения Вороного-Дирихле? Существует ли физическое обоснование выбора, к какому из атомов она должна быть сдвинута относительно середины межатомного расстояния?

д.ф.-м.н. Ананьев И.В.: Проводили ли сравнительный анализ площади межатомной поверхности с такими характеристиками электронной плотности в связевой критической точке как $\rho(\mathbf{r})$ или $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$?

д.х.н. Долгушин Ф.М.: Сформулируйте кратко, в каких кристаллохимических задачах дает хороший результат ваша методика в сравнении с другими теориями?

к.х.н. Якушев И.А.: Насколько применим ваш метод для координационных полимеров?

акад. РАН Еременко И.Л.: Можно ли использовать этот подход для предварительного анализа соединений, перспективных в катализе, медицине и других практически важных применениях?

На все вопросы соискателем были предоставлены развернутые ответы.

Таким образом, диссертация Вологжаниной Анны Владимировны является научно-квалификационной работой, в которой разработан общий 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 для широкого круга органических, элементоорганических и координационных соединений, в том числе практически-важные для современных технологий и медицины.

Диссертационная работа Вологжаниной Анны Владимировны «Топологический анализ как универсальный подход для изучения молекул в кристаллическом поле: от молекулярных органических соединений до ассоциатов с биомакромолекулами» на соискание ученой степени доктора химических наук полностью соответствует требованиям, изложенным в пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН) от 29 марта 2024 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук.

По результатам заседания секции «Координационная химия» Учёного совета ИОНХ РАН постановили:

1. Утвердить положительное заключение секции «Координационная химия» по диссертации Вологжаниной Анны Владимировны «Топологический анализ как универсальный подход для изучения молекул в кристаллическом поле: от молекулярных органических соединений до ассоциатов с биомакромолекулами» на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4- Физическая химия.

2. Рекомендовать диссертацию «Топологический анализ как универсальный подход для изучения молекул в кристаллическом поле: от молекулярных органических соединений до ассоциатов с биомакромолекулами» к защите по специальности 1.4.4. Физическая химия (Химические науки) на диссертационном совете 01.4.004.93.

3. Рекомендовать в качестве официальных оппонентов (давших на это свое письменное согласие):

- д. х. н., акад. РАН, проф., г.н.с. Горбунову Юлию Германовну (Лаборатория координационной химии щелочных и редких металлов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук»)

- д. х. н., проф., в.н.с. Барташевич Екатерину Владимировну (НИЛ «Многомасштабное моделирование многокомпонентных функциональных материалов» Южно-Уральского государственного университета)

- д. х. н., проф. РАН, в.н.с. Фукина Георгия Константиновича (Группа рентгенодифракционных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт металлорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук»)

4. Рекомендовать в качестве ведущей организации Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет», предоставивший на это письменное согласие.

Заключение принято на расширенном заседании секции «Координационная химия» учёного совета ИОНХ РАН 22 мая 2025 г. (протокол №4/2). Присутствовало на заседании 24 человека, в том числе: членов секции «Координационная химия» - 11, докторов наук – 11, кандидатов наук – 12.

Результаты голосования: «**за**» - **11** человек, «**против**» - **0** человек, «**воздержалось**» - **0** человек.

Решение принято единогласно.

Председатель секции «Координационная химия» Ученого совета ИОНХ РАН, академик РАН

Еременко И.Л.

Учёный секретарь секции «Координационная химия» Ученого совета ИОНХ РАН, к.х.н.

Николаевский С.А.