

Заключение диссертационного совета МГУ.014.3  
по диссертации на соискание ученой степени доктора наук  
Решение диссертационного совета от «13» сентября 2024 г. № 177

О присуждении Ананьеву Ивану Вячеславовичу, гражданину Российской Федерации ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Устойчивость молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов и прочность межатомных взаимодействий в теории "Атомы в Молекулах"» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите диссертационным советом 19.04.24, протокол № 174.

Соискатель Ананьев Иван Вячеславович, 1989 года рождения, защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук «Структурная нежесткость в молекулярных кристаллах по данным рентгенодифракционных исследований и квантовохимических расчетов» в 2013 году, в диссертационном совете Д 002.250.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН.

Соискатель работает ведущим научным сотрудником, заведующим лабораторией Квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН.

Диссертация выполнена в Лаборатории рентгеноструктурных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук и в Лаборатории квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Цирельсон Владимир Григорьевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», заведующий Кафедрой квантовой химии;

Эварестов Роберт Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский Государственный Университет», Институт химии, заведующий Кафедрой квантовой химии;

Оганов Артем Ромаевич, доктор физико-математических наук, профессор РАН, Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования

«Сколковский институт науки и технологий» заведующий Лабораторией дизайна материалов.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области исследований электронного строения молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов, а также наличием большого количества публикаций в ведущих российских и международных изданиях по вопросам, близким к проблематике диссертационной работы.

Соискатель имеет 156 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 62 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. Физическая химия и физико-математической отрасли наук.

1. Anisimov A.A., Ananyev I.V. On the relationship between the strength of bonding between topological atoms and the exchange-correlation energy // International Journal of Quantum Chemistry — 2023. — Vol. 123, no. 9. — P. e27082-1–e27082-8. 0.5 п.л., Вклад автора 75%. (Q2, JIF WoS 2.437)
2. Anisimov A.A., Ananyev I.V. Interatomic exchange-correlation interaction energy from a measure of Quantum Theory of Atoms in Molecules topological bonding: A diatomic case // Journal of Computational Chemistry. — 2020. Vol. 41, no. 25. — P. 2213–2222. 0.6 п.л., Вклад автора 80%. (Q1, JIF WoS 3.672)
3. Anisimov A.A., Ananyev I.V. Electron density-based protocol to recover the interacting quantum atoms components of intermolecular binding energy // Journal of Chemical Physics — 2023. — Vol. 159, no. 12. — P. 124113-1–124113-8. 0.5 п.л., Вклад автора 60%. (Q1, JIF WoS 4.304)
4. Ананьев И.В., Нелюбина Ю.В., Корлюков А.А., Барзилович П.Ю., Антипин М.Ю., Алдошин С.М., Лысенко К.А. Природа химической связи в нитрамите // Известия Академии Наук Серия химическая — 2011. — Т. 60, № 11. — С. 2120–2133. 0.8 п.л., Вклад автора 70%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Ananyev I. V., Nelyubina Yu. V., Korlyukov A.A., Barzilovich P.Yu., Antipin M.Yu., Aldoshin S.M., Lyssenko K.A. The nature of chemical bonding in nitramide // Russian Chemical Bulletin — 2011. — Vol. 60, № 11. — P. 2161–2174. Импакт-фактор WoS 1.222]
5. Ананьев И.В., Лысенко К.А. Эффекты сопряжения в молекуле пара-нитроанилина и его структурная жесткость // Известия Академии Наук Серия химическая — 2014. — Т. 63, № 6. — P. 1270–1282. 0.75 п.л., Вклад автора 80%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Ananyev I. V., Lyssenko K.A. Conjugation effects in a para-nitroaniline molecule and its

structural non-rigidity // Russian Chemical Bulletin — 2014. — Vol. 63, № 6. — P. 1270–1282.

Импакт-фактор WoS 1.222]

6. Panova M.V., Medvedev M.G., Bushmarinov I.S., Ananyev I.V., Lyssenko K.A. Supramolecular stereoelectronic effect in hemiketals // Mendeleev Communications — 2017. — Vol. 27, no. 6. — P. 595–598. 0.2 п.л., Вклад автора 20%. (Q3, JIF WoS 2.944)

7. Romanova A., Lyssenko K., Ananyev I. Estimations of energy of noncovalent bonding from integrals over interatomic zero-flux surfaces: Correlation trends and beyond // Journal of Computational Chemistry. — 2018. — Vol. 39, no. 21. — P. 1607–1616. 0.6 п.л., Вклад автора 70%. (Q1, JIF WoS 3.672)

8. Karnoukhova V.A., Fedyanin I.V., Dubasova E.V., Anisimov A.A., Ananyev I.V. Concerning virial-based estimations of strength of bonding intermolecular interactions in molecular crystals and supramolecular complexes // Mendeleev Communications — 2023. — Vol. 33, no. 3. — P. 353–356. 0.2 п.л., Вклад автора 60%. (Q3, JIF WoS 1.837)

9. Ananyev I.V., Karnoukhova V.A., Dmitrienko A.O., Lyssenko K.A. Toward a Rigorous Definition of a Strength of Any Interaction Between Bader's Atomic Basins // Journal of Physical Chemistry A — 2017. — Vol. 121, no. 23. P. 4517–4522. 0.3 п.л., Вклад автора 70%. (Q2, JIF WoS 2.944)

10. Ананьев И.В., Медведев М.Г., Алдошин С.М., Еременко И.Л., Лысенко К.А. Колебательное размывание электронной плотности как функция силы и направленности межатомных взаимодействий: невалентные взаимодействия нитрогруппы в островном кристалле  $[\text{Fe}(\text{NO})_2(\text{SC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)]_2$  // Известия Академии Наук Серия химическая — 2016. — Т. 65, № 5. — С. 1178–1188. 0.65 п.л., Вклад автора 80%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Ananyev I. V., Medvedev M.G., Aldoshin S.M., Eremenko I.L., Lyssenko K.A. Vibrational smearing of the electron density as function of the strength and directionality of interatomic interactions: nonvalent interactions of a nitro group within an island-type crystal  $[\text{Fe}(\text{NO})_2(\text{SC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)]_2$  // Russian Chemical Bulletin — 2016. — Vol. 65, № 6. — P. 1473–1487. Импакт-фактор WoS 1.222]

11. Ananyev I.V., Fershtat L.L. Why pay more? QTAIM descriptors of non-covalent interactions in S22 from promolecular electron density // Mendeleev Communications — 2023. — Vol. 33, no. 6. — P. 806–808. 0.2 п.л., Вклад автора 90%. (Q3, JIF WoS 2.944)

12. Ананьев И.В., Ферштат Л.Л. Правомочность оценок заселенности поверхностей между топологическими атомами из свойств в критических точках // Известия Академии Наук Серия химическая — 2024. — Т. 73, № 1. — С. 110–116. 0.4 п.л., Вклад автора 90%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Ananyev I. V., Fershtat L.L. Electron population of Bader's interatomic surfaces: relevance of estimates based on the electron density function

values at critical points // Russian Chemical Bulletin — 2024. — Vol. 73, № 1. — P. 110–116.

Импакт-фактор WoS 1.222]

13. Ananyev I.V., Lyssenko K.A. A chemist's point of view: the noncylindrical symmetry of electron density means nothing but still means something // Mendeleev Communications — 2016. — Vol. 26, no. 4. — P. 338–340. 0.2 п.л., Вклад автора 80%. (Q3, JIF WoS 2.944)

14. Ананьев И.В. Альтернативные траектории электронной плотности для построения графа связности атомов в области ненаправленных взаимодействий // Известия Академии Наук Серия химическая — 2011. — Т. 60, № 11. — С. 2120–2133 0.8 п.л., Вклад автора 100%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) . [Ananyev I. V. Alternative trajectories of electron density to plot the atomic connectivity graph in the region of nondirectional interactions // Russian Chemical Bulletin — 2019. — Vol. 68, № 7. — P. 1343–1349. Импакт-фактор WoS 1.222]

15. Анисимов А.А., Ананьев И.В. Энергетическое рассмотрение плотности молекулярных кристаллов: взаимосвязь энергии межмолекулярного взаимодействия и изменения объема молекулы // Известия Академии Наук Серия химическая — 2021. — Т. 70, № 8. — С. 1429–1437. 0.5 п.л., Вклад автора 60%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Anisimov A.A., Ananyev I. V. Revisiting the energy treatment of the density of molecular crystals: an interrelation between intermolecular interaction energies and changes of molecular volume // Russian Chemical Bulletin — 2021. — Vol. 70, № 8. — P. 1429–1437. Импакт-фактор WoS 1.222]

16. Larin A.A., Pivkina A.N., Ananyev I.V., Khakimov D.V., Fershtat L.L. Novel family of nitrogen-rich energetic (1,2,4-triazolyl) furoxan salts with balanced performance // Frontiers in Chemistry — 2022. — Vol. 10. — P. 1012605-1–1012605-12. 0.75 п.л., Вклад автора 20%. (Q1, JIF WoS 5.545)

17. Zhilin E.S., Ananyev I.V., Pivkina A.N., Fershtat L.L. Renaissance of dinitroazetidine: novel hybrid energetic boosters and oxidizers // Dalton Transactions — 2022. — Vol. 51, no. 37. — P. 14088–14096. 0.5 п.л., Вклад автора 25%. (Q1, JIF WoS 4.569)

18. Epishina M.A., Kulikov A.S., Ananyev I.V., Anisimov A.A., Monogarov K.A., Fershtat L.L. Impact of regiochemistry in energetic materials science: a case of (nitratomethyl-1,2,3-triazolyl)furazans // Dalton Transactions — 2023. — Vol. 52, no. 22. — P. 7673–7683. 0.65 п.л., Вклад автора 17%. (Q1, JIF WoS 4.569)

19. Larin A.A., Degtyarev D.D., Ananyev I.V., Pivkina A.N., Fershtat L.L. Linear furoxan assemblies incorporating nitrobifuroxan scaffold: en route to new high-performance energetic materials // Chemical Engineering Journal — 2023. — Vol. 470. — P. 144144-1–144144-11. 0.7 п.л., Вклад автора 20%. (Q1, JIF WoS 16.744)

20. Suponitsky K.Yu., Lyssenko K.A., Ananyev I.V., Kozeev A.M., Sheremetev A.B. Role of Weak Intermolecular Interactions in the Crystal Structure of Tetrakis-furazano[3,4-c:3',4'-g:3'',4''-k:3''',4'''-o][1,2,5,6,9,10,13,14]octaazacyclohexadecine and Its Solvates // *Crystal Growth & Design* — 2014. — Vol. 14, no. 9. — P. 4439–4449. 0.65 п.л., Вклад автора 40%. (Q2, JIF WoS 4.01)
21. Rozhkov A.V., Ananyev I.V., Gomila R.M., Frontera A., Kukushkin V.Yu.  $\pi$ -Hole $\cdots$ dz2 [Pt II] Interactions with Electron-Deficient Arenes Enhance the Phosphorescence of Pt<sup>II</sup>-Based Luminophores // *Inorganic Chemistry* — 2020. — Vol. 59, no. 13. P. 9308–9314. 0.6 п.л., Вклад автора 20%. (Q1, JIF WoS 5.436)
22. Kotov V.Yu., Buikin P.A., Ilyukhin A.B., Korlyukov A.A., Ananyev I.V., Gavrikov A.V., Medvedev M.G. Hybrid iodobismuthates code: adapting the geometry of Bi polyhedra to weak interactions // *Mendeleev Communications* — 2021. — Vol. 31, no. 2. — P. 166–169. 0.2 п.л., Вклад автора 14%. (Q3, JIF WoS 2.944)
23. Ananyev I.V., Nefedov S.E., Lyssenko K.A. From Coordination Polyhedra to Molecular Environment and Back – Interplay between Coordinate and Hydrogen Bonds in Two Polymorphs of a Cobalt Complex // *European Journal of Inorganic Chemistry* — 2013. — Vol. 2013, no. 15. — P. 2736–2743. 0.45 п.л., Вклад автора 90%. (Q2, JIF WoS 2.551)
24. Ananyev I.V., Bushmarinov I.S., Ushakov I.E., Aitkulova A.I., Lyssenko K.A. Tuning of the double-well potential of short strong hydrogen bonds by ionic interactions in alkali metal hydrodicarboxylates // *RSC Advances* — 2015. — Vol. 5, no. 118. — P. 97495–97502. 0.5 п.л., Вклад автора 70%. (Q2, JIF WoS 4.036)
25. Utochnikova V.V., Kovalenko A.D., Burlov A.S., Marciniak L., Ananyev I.V., Kalyakina A.S., Kurchavov N.A., Kuzmina N.P. Lanthanide complexes with 2-(tosylamino)benzylidene-N-benzoylhydrazone, which exhibit high NIR emission // *Dalton Transactions* — 2015. — Vol. 44, no. 28. — P. 12660–12669. 0.5 п.л., Вклад автора 13%. (Q1, JIF WoS 4.569)
26. Roitershtein D.M., Vinogradov A.A., Vinogradov A.A., Lyssenko K.A., Nelyubina Y. V., Anan'ev I.V., Nifant'ev I.E., Yakovlev V.A., Kostitsyna N.N. Di- and Triphenylacetates of Lanthanum and Neodymium. Synthesis, Structural Diversity, and Application in Diene Polymerization // *Organometallics* — 2013. — Vol. 32, no. 5. — P. 1272–1286. 0.9 п.л., Вклад автора 11%. (Q1, JIF WoS 3.837)
27. Ананьев И.В., Нелюбина Ю.В., Пунтус Л.Н., Лысенко К.А., Еременко И.Л. Особенности связывания металл-лиганд в тринитратных комплексах европия с точки зрения сравнительного анализа распределения электронной плотности в кристаллах // *Известия Академии Наук Серия химическая* — 2016. — Т. 65, № 5. — С. 1178–1188. 0.65

- п.л., Вклад автора 70%. (Q3, ИмпаKT-фактор PИHЦ 1.549) [Ananyev I. V., Nelyubina Yu. V., Puntus L.N., Lyssenko K.A., Eremenko I.L. Peculiarities of metal—ligand bonding in europium trinitrate complexes: a viewpoint of comparative charge density analysis in crystals // Russian Chemical Bulletin — 2016. — Vol. 65, № 5. — P. 1178–1188. ИмпаKT-фактор WoS 1.222]
28. Matveev P.I., Huang P.-W., Kirsanova A.A., Ananyev I.V., Sumyanova T.B., Kharcheva A.V., Khvorostinin E.Yu., Petrov V.G., Shi W.-Q., Kalmykov S.N., Borisova N.E. Way to Enforce Selectivity via Steric Hindrance: Improvement of Am(III)/Eu(III) Solvent Extraction by Loaded Diphosphonic Acid Esters // Inorganic Chemistry — 2021. — Vol. 60, no. 19. — P. 14563–14581. 1.1 п.л., Вклад автора 9%. (Q1, JIF WoS 5.436)
29. Kalyakina A.S., Utochnikova V.V., Bushmarinov I.S., Ananyev I.V., Eremenko I.L., Volz D., Rönicke F., Schepers U., Van Deun R., Trigub A.L., Zubavichus Y. V., Kuzmina N.P., Bräse S. Highly Luminescent, Water-Soluble Lanthanide Fluorobenzoates: Syntheses, Structures and Photophysics, Part I: Lanthanide Pentafluorobenzoates // Chemistry – A European Journal. — 2015. — Vol. 21, no. 49. — P. 17921–17932. 0.7 п.л., Вклад автора 10%. (Q1, JIF WoS 5.020)
30. Utochnikova V.V., Solodukhin N.N., Aslandukov A.A., Zaitsev K.V., Kalyakina A.S., Averin A.A., Ananyev I.V., Churakov A.V., Kuzmina N.P. Luminescence Enhancement by *p*-Substituent Variation // European Journal of Inorganic Chemistry — 2017. — Vol. 2017, no. 1. — P. 107–114. 0.45 п.л., Вклад автора 11%. (Q2, JIF WoS 2.551)
31. Kiraev S.R., Nikolaevskii S.A., Kiskin M.A., Ananyev I.V., Varaksina E.A., Taydakov I.V., Aleksandrov G.G., Goloveshkin A.S., Sidorov A.A., Lyssenko K.A., Eremenko I.L. Synthesis, structure and photoluminescence properties of {Zn<sub>2</sub>Ln<sub>2</sub>} heterometallic complexes with anions of 1-naphthylacetic acid and N-donor heterocyclic ligands // Inorganica Chimica Acta — 2018. — Vol. 477. — P. 15–23. 0.5 п.л., Вклад автора 9%. (Q2, JIF WoS 3.118)
32. Lutsenko I.A., Kiskin M.A., Nikolaevskii S.A., Starikova A.A., Efimov N.N., Khoroshilov A.V., Bogomyakov A.S., Ananyev I.V., Voronina J.K., Goloveshkin A.S., Sidorov A.A., Eremenko I.L. Ferromagnetically Coupled Molecular Complexes with a Co<sup>II</sup>Gd<sup>III</sup> Pivalate Core: Synthesis, Structure, Magnetic Properties and Thermal Stability // ChemistrySelect. — 2019. — Vol. 4, no. 48. — P. 14261–14270. 0.6 п.л., Вклад автора 8%. (Q2, JIF WoS 2.307)
33. Melnikov S.N., Evstifeev I.S., Nikolaveskii S.A., Ananyev I.V., Varaksina E.A., Taydakov I.V., Goloveshkin A.S., Sidorov A.A., Kiskin M.A., Eremenko I.L. The effect of terminal N-donor aromatic ligands on the sensitization and emission of lanthanide ions in Zn<sub>2</sub>Ln (Ln = Eu, Tb) complexes with 4-biphenylcarboxylate anions // New Journal of Chemistry — 2021. — Vol. 45, no. 30. — P. 13349–13359. 0.65 п.л., Вклад автора 10%. (Q2, JIF WoS 3.925)

34. Ananyev I.V., Barzilovich P.Yu., Lyssenko K.A. Evidence for the Zundel-like Character of Oxoethylidenediphosphonic Acid Hydrate // *Mendeleev Communications* — 2012. — Vol. 22, no. 5. — P. 242–244. 0.2 п.л., Вклад автора 90%. (Q3, JIF WoS 2.944)
35. Nelyubina Yu. V., Ananyev I.V., Novikov V.V., Lyssenko K.A. Invariom approach to electron density studies of open-shell compounds: the case of an organic nitroxide radical // *RSC Advances* — 2016. — Vol. 6, no. 94. — P. 91694–91710. 1 п.л., Вклад автора 50%. (Q2, JIF WoS 4.036)
36. Novikov V.V., Ananyev I.V., Pavlov A.A., Fedin M. V., Lyssenko K.A., Voloshin Y.Z. Spin-Crossover Anticooperativity Induced by Weak Intermolecular Interactions // *Journal of Physical Chemistry Letters* — 2014. — Vol. 5, no. 3. — P. 496–500. 0.3 п.л., Вклад автора 40%. (Q1, JIF WoS 6.888)
37. Rozhkov A.V., Ananyev I.V., Petrov A.A., Galmés B., Frontera A., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. Ligand Steric Hindrances Switch Bridging ( $\mu_2$ -I)···O,O to Two-Center I···O Halogen-Bonding Mode in the Assembly of Diketonate Copper(II) Species // *Crystal Growth & Design* — 2021. — Vol. 21, no. 7. — P. 4073–4082. 0.6 п.л., Вклад автора 15%. (Q2, JIF WoS 4.010)
38. Ivanov D.M., Kinzhalov M.A., Novikov A.S., Ananyev I.V., Romanova A.A., Boyarskiy V.P., Haukka M., Kukushkin V.Yu.  $H_2C(X)-X\cdots X^-$  ( $X=Cl, Br$ ) Halogen Bonding of Dihalomethanes // *Crystal Growth & Design* — 2017. — Vol. 17, no. 3. — P. 1353–1362. 0.6 п.л., Вклад автора 13%. (Q2, JIF WoS 4.010)
39. Eliseeva A.A., Ivanov D.M., Rozhkov A.V., Ananyev I.V., Frontera A., Kukushkin V.Yu. Bifurcated Halogen Bonding Involving Two Rhodium(I) Centers as an Integrated  $\sigma$ -Hole Acceptor // *Journal of American Chemical Society Au.* — 2021. — Vol. 1, no. 3. — P. 354–361. 0.45 п.л., Вклад автора 17%. (JIF WoS 8.0).
40. Rozhkov A.V., Ivanov D.M., Novikov A.S., Ananyev I.V., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. Metal-involving halogen bond  $Ar-I\cdots[d_{22}Pt^{II}]$  in a platinum acetylacetonate complex // *CrystEngComm* — 2020. — Vol. 22, no. 3. — P. 554–563. 0.6 п.л., Вклад автора 17%. (Q2, JIF WoS 3.756)
41. Ivanov D.M., Novikov A.S., Ananyev I.V., Kirina Y.V., Kukushkin V.Yu. Halogen bonding between metal centers and halocarbons // *Chemical Communications* — 2016. — Vol. 52, no. 32. — P. 5565–5568. 0.2 п.л., Вклад автора 20%. (Q1, JIF WoS 6.065)
42. Bikbaeva Z.M., Ivanov D.M., Novikov A.S., Ananyev I.V., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. Electrophilic–Nucleophilic Dualism of Nickel(II) toward  $Ni\cdots I$  Noncovalent Interactions: Semicoordination of Iodine Centers via Electron Belt and Halogen Bonding via  $\sigma$ -Hole //

Inorganic Chemistry — 2017. — Vol. 56, no. 21. — P. 13562–13578. 1 п.л., Вклад автора 17%. (Q1, JIF WoS 5.436)

43. Лысенко К.А., Ананьев И.В., Алдошин С.М., Санина Н.А. Особенности химического связывания в  $\text{Fe}(\text{NO})_2$ -фрагменте на примере кристалла тетраметиламмонийной соли бис(тиосульфат)тетранитрозилдижелеза по данным прецизионного исследования электронной плотности // Известия Академии Наук Серия химическая — 2015. — Т. 64, № 10. — С. 2351–2360. 0.6 п.л., Вклад автора 40%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Lyssenko K.A., Ananyev I. V., Aldoshin S.M., Sanina N.A. Features of chemical bonding within the  $\text{Fe}(\text{NO})_2$  fragment for crystalline bis(thiosulfate) tetranitrosyl diiron tetramethylammonium salt as an example according to high-resolution X-ray diffraction data // Russian Chemical Bulletin. — 2015. — Vol. 64, № 10. — P. 2351–2360. Импакт-фактор WoS 1.222]

44. Kovalenko A.A., Nelyubina Y. V., Korlyukov A.A., Lyssenko K.A., Ananyev I.V. The truth is out there: the metal- $\pi$  interactions in crystal of  $\text{Cr}(\text{CO})_3(\text{pcp})$  as revealed by the study of vibrational smearing of electron density // Zeitschrift fur Kristallographie – Crystalline Materials — 2018. — Vol. 233, no. 5. — P. 317–336. 0.6 п.л., Вклад автора 80%. (Q3, JIF WoS 1.62)

45. Chernyshov I.Yu., Ananyev I.V., Pidko E.A. Revisiting van der Waals Radii: From Comprehensive Structural Analysis to Knowledge-Based Classification of Interatomic Contacts // ChemPhysChem. — 2020. — Vol. 21, no. 5. — P. 370–376. 0.4 п.л., Вклад автора 33%. (Q2, JIF WoS 3.52)

46. Дмитриенко А.О., Ананьев И.В. Кластеризация невалентно связанных фрагментов  $\text{NO}_2\dots\text{O}_2\text{N}$  при  $\text{sp}^3$ -гибридизованных атомах углерода // Известия Академии Наук Серия химическая — 2019. — Т. 68, № 1. — С. 1–8. 0.5 п.л., Вклад автора 80%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) [Dmitrienko A.O., Ananyev I. V. Clustering of nonvalently bonded  $\text{NO}_2\dots\text{O}_2\text{N}$  fragments at  $\text{C}(\text{sp}^3)$  atoms // Russian Chemical Bulletin — 2019. — Vol. 68, № 1. — P. 1–8. Импакт-фактор WoS 1.222]

47. Мельников С.Н., Лысенко К.А., Ананьев И.В., Еременко И.Л. Природа и прочность слабых межмолекулярных взаимодействий с атомами металла в кристаллах плоскоквадратных комплексов никеля(II) // Известия Академии Наук Серия химическая — 2017. — Т. 66, № 9. — С. 1550–1556 0.4 п.л., Вклад автора 80%. (Q3, Импакт-фактор РИНЦ 1.549) . [Melnikov S.N., Lyssenko K.A., Ananyev I. V., Eremenko I.L. Nature and strength of weak intermolecular interactions with metal atoms in crystals of square-planar nickel(ii) complexes // Russian Chemical Bulletin — 2017. — Vol. 66, № 9. — P. 1550–1556. Импакт-фактор WoS 1.222]



48. Dolgushin F.M., Goloveshkin A.S., Ananyev I.V., Osintseva S.V., Torubaev Y.V., Krylov S.S., Golub A.S. Interplay of noncovalent interactions in antiseptic quaternary ammonium surfactant Miramistin // *Acta Crystallographica* — 2019. — Vol. C75, no. 4. — P. 402–411. 0.6 п.л., Вклад автора 15%. (Q3, JIF WoS 1.184)
49. Epishina M.A., Kulikov A.S., Fershtat L.L., Ananyev I.V., Makhova N.N. Synthesis of new pharmacologically oriented heterocyclic ensembles, [2-(1H-pyrazol-1-yl)thiazol-4-yl]furoxans // *Mendeleev Communications* — 2019. — Vol. 29, no. 3. — P. 288–291. 0.2 п.л., Вклад автора 20%. (Q3, JIF WoS 2.944)
50. Teslenko F.E., Churakov A.I., Larin A.A., Ananyev I.V., Fershtat L.L., Makhova N.N. Route to 1,2,4- and 1,2,5-oxadiazole ring assemblies via a one-pot condensation/oxidation protocol // *Tetrahedron Letters* — 2020. — Vol. 61, no. 13. — P. 151678-1–151678-5. 0.3 п.л., Вклад автора 17%. (Q3, JIF WoS 2.032)
51. Titenkova K.Y., Shaferov A.V., Larin A.A., Epishina M.A., Kulikov A.S., Ananyev I.V., Fershtat L.L. Tandem acid-promoted intramolecular azide-hydrazone electrocyclization/hydrolysis approach for the synthesis of N-Aminotetrazoles // *Tetrahedron* — 2022. — Vol. 103, no. 1. — P. 132563-1–132563-16. 1 п.л., Вклад автора 15%. (Q2, JIF WoS 2.388)
52. Bystrov D.M., Ananyev I.V., Fershtat L.L., Makhova N.N. Direct Synthesis of *N*-(1,2,5-Oxadiazolyl)hydrazones through a Diazotization/Reduction/Condensation Cascade // *Journal of Organic Chemistry* — 2020. — Vol. 85, no. 23. — P. 15466–15475. 0.6 п.л., Вклад автора 25%. (Q1, JIF WoS 4.198)
53. Druzina A.A., Zhidkova O.B., Dudarova N. V., Kosenko I.D., Ananyev I.V., Timofeev S. V., Bregadze V.I. Synthesis and Structure of Nido-Carboranyl Azide and Its “Click” Reactions // *Molecules* — 2021. — Vol. 26, no. 3. — P. 530-1–530-14. 0.9 п.л., Вклад автора 15%. (Q1, JIF WoS 4.927)
54. Druzina A.A., Kosenko I.D., Zhidkova O.B., Ananyev I.V., Timofeev S. V., Bregadze V.I. Novel Cobalt Bis(dicarbollide) Based on Terminal Alkynes and Their Click-Reactions // *European Journal of Inorganic Chemistry* — 2020. — Vol. 2020, no. 27. — P. 2658–2665. 0.45 п.л., Вклад автора 20%. (Q2, JIF WoS 2.551)
55. Zhilin E.S., Polkovnichenko M.S., Ananyev I.V., Fershtat L.L., Makhova N.N. Novel Arylazo-1,2,5-oxadiazole Photoswitches: Synthesis, Photoisomerization and Nitric Oxide Releasing Properties // *ChemPhotoChem* — 2020. — Vol. 4, no. 12. — P. 5346–5354. 0.5 п.л., Вклад автора 20%. (Q2, JIF WoS 3.679)
56. Farat O.K., Farat S.A., Ananyev I.V., Okovytyy S.I., Tatars A.L., Markov V.I. Novel xanthene push-pull chromophores and luminophores: Synthesis and study of their spectral

properties // *Tetrahedron* — 2017. — Vol. 73, no. 51. — P. 7159–7168. 0.6 п.л., Вклад автора 30%. (Q2, JIF WoS 2.388)

57. Farat O.K., Ananyev I.V., Varenichenko S.A., Tatarets A.L., Markov V.I. Vilsmeier-Haack reagent: An efficient reagent for the transformation of substituted 1,3-naphthoxazines into xanthene-type dyes // *Tetrahedron* — 2019. — Vol. 75, no. 19. — P. 2832–2842. 0.65 п.л., Вклад автора 40%. (Q2, JIF WoS 2.388)

58. Farat O.K., Ananyev I.V., Varenichenko S.A., Zaloznaya E. V., Markov V.I. A facile approach for the synthesis of novel xanthene derivatives with Vilsmeier–Haack reagent // *Chemistry of Heterocyclic Compounds* — 2019. — Vol. 55, no. 1. — P. 38–46. 0.5 п.л., Вклад автора 40%. (Q3, JIF WoS 1.49)

59. Farat O.K., Ananyev I.V., Tatarets A.L., Varenichenko S.A., Zaloznaya E. V., Markov V.I. Influence of the amidine fragment on spectral properties of xanthene dyes // *Journal of Molecular Structure* — 2021. — Vol. 1224, no. 1. — P. 129191-1–129191-10. 0.65 п.л., Вклад автора 17%. (Q2, JIF WoS 3.841)

60. Ananyev I.V., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. Structure-directing sulfur...metal noncovalent semicoordination bonding // *Acta Crystallographica* — 2020. — Vol. B76, no. 3. — P. 436–449. 0.8 п.л., Вклад автора 90%. (Q2, JIF WoS 2.684)

61. Laskova J., Ananiev I., Kosenko I., Serdyukov A., Stogniy M., Sivaev I., Grin M., Semioshkin A., Bregadze V.I. Nucleophilic addition reactions to nitrilium derivatives  $[B_{12}H_{11}NCCH_3]^-$  and  $[B_{12}H_{11}NCCH_2CH_3]^-$ . Synthesis and structures of closo-odecaborate-based iminols, amides and amidines // *Dalton Transactions* — 2022. — Vol. 51, no. 8. — P. 3051–3059. 0.65 п.л., Вклад автора 13%. (Q1, JIF WoS 4.569)

62. Torubaev Y.V., Skabitsky I.V., Anisimov A.A., Ananyev I.V. Long-range supramolecular synthon polymorphism: a case study of two new polymorphic cocrystals of  $Ph_2Te_2-1,4-C_6F_4I_2$  // *CrystEngComm* — 2022. — Vol. 24, no. 7. — P. 1442–1452. 0.65 п.л., Вклад автора 70%. (Q2, JIF WoS 3.756)

На диссертацию и автореферат поступило 7 дополнительных отзывов, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором теоретических и экспериментальных исследований пространственной и электронной структуры молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов решена проблема интерпретации относительной устойчивости минимумов поверхности потенциальной энергии на языке величин, определяемых из одноэлектронной матрицы плотности, и

предложены одноэлектронные методы для изучения вкладов межатомных взаимодействий в стабильность структуры химических соединений.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Методы описания электронной структуры в координатном пространстве и, в частности, квантово-топологическая теория «Атомы в Молекулах» позволяют построить согласованную с методами локализации орбиталей, но орбитально-инвариантную теорию химической связи как наличия общей поверхности топологических атомов, влияющего на внутреннюю структуру атомных бассейнов.

2. Поверхность топологического атома полностью описывает специфику его взаимодействий и может быть использована для оценки атомного вклада в характеристики ППЭ, соответствующие энергетической стабильности многоатомной системы в заданной геометрии и ее колебательной подвижности.

3. Исследования связывающих атомных взаимодействий, плохо описываемых в двухцентровом приближении, можно проводить с использованием анализа набора топологических связей, получаемых при возмущениях электронной плотности при сдвигах атомных ядер.

4. Анализ распределения электронной плотности и плотности потенциальной электронной энергии позволяет воссоздать непротиворечивую картину межатомных и межмолекулярных взаимодействий и оценить их вклад в устойчивость широкого круга химических веществ, таких как гетероциклические соединения, органические и фосфорорганические кислоты, комплексы переходных, щелочных и редкоземельных металлов, полиэдрические соединения бора.

На заседании 13 сентября 2024 года диссертационный совет принял решение присудить Ананьеву И.В. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за 13, против 1, недействительных бюллетеней 1.

Председатель диссертационного совета

д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета

к.х.н., доцент

Шилина М.И.

13 сентября 2024 года