

ПРОТОКОЛ № 12

Заседания Диссертационного совета 24.1.150.01 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН)

г. Новосибирск

17 июля 2026 г.

Председатель - д.х.н., доцент Онищук А.А.

Ученый секретарь - к.х.н. Поздняков И.П.

ПРИСУТСТВОВАЛИ: 19 членов совета из 24 человек: д.х.н. Онищук А.А., д.ф.-м.н. Дзюба С.А., к.х.н. Поздняков И.П., д.ф.-м.н. Багрянский В.А., д.ф.-м.н. Багрянская Е.Г., д.ф.-м.н. Боровков В.И., д.ф.-м.н. Глебов Е.М., д.ф.-м.н. Ершов А.П., д.ф.-м.н. Зарко В.Е., д.х.н. Козлова Е.А., д.ф.-м.н. Козлова С.Г., д.ф.-м.н. Крумкачева О.А., д.ф.-м.н. Кулик Л.В., д.ф.-м.н. Луксен Н.Н., д.х.н. Поляков Н.Э., д.ф.-м.н. Пуртов П.А., д.ф.-м.н. Федин М.В., д.х.н. Чесноков Е.Н., д.х.н. Шмаков А.Г.

ОТСУТСТВОВАЛИ: д.х.н. Бакланов А.В., д.х.н. Грицан Н.П., д.ф.-м.н. Медведев Н.Н., д.ф.-м.н. Палецкий А.А., д.ф.-м.н. Черемисин А.А.

ПОВЕСТКА ДНЯ

Прием к защите диссертации **Тупикиной Елены Юрьевны** на тему **«Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Место выполнения диссертации: Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ), г. Санкт-Петербург.

Научный консультант: доктор химических наук, академик РАН **Кукушкин Вадим Юрьевич**, профессор Института химии Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ), г. Санкт-Петербург.

Экспертная комиссия диссовета:

д.х.н., проф. Грицан Нина Павловна,

д.ф.-м.н., с.н.с. Медведев Николай Николаевич,

д.ф.-м.н., профессор РАН Федин Матвей Владимирович.

СЛУШАЛИ:

Ученого секретаря диссовета, к.х.н. Позднякова И.П. о документах, поступивших и подготовленных в диссертационном совете (заключение экспертной комиссии диссовета по диссертации Тупикиной Е.Ю., официальные согласия предполагаемых оппонентов и ведущей организации, список рассылки автореферата).

Члена экспертной комиссии диссертационного совета д.ф.-м.н., профессора РАН Федина Матвея Владимировича о заключении комиссии для принятия к защите диссертации Тупикиной Елены Юрьевны.

ПОСТАНОВИЛИ:

1. Принять к защите диссертацию **Тупикиной Елены Юрьевны** на тему **«Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».
2. Диссертация Тупикиной Е.Ю., Диссертационная работа соответствует паспорту научной специальности 1.3.17. - «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (отрасль науки – физико-математические) по следующим направлениям исследований.

По направлению 1. «Атомно-молекулярная структура химических частиц и веществ, механизмы химического превращения, молекулярная, энергетическая, химическая и спиновая динамика элементарных процессов...» в диссертации исследуются атомно-молекулярная структура и электронное строение широкого класса систем, стабилизированных водородными, галогенными, халькогенными и другими нековалентными взаимодействиями, на основе современных методов квантовой химии. Особое внимание уделено физической природе и энергетике элементарных актов образования и разрушения таких контактов, перераспределению электронной и ядерной плотности, а также построению структурно-спектральных корреляций, связывающих геометрию, энергию и спектральные параметры (ИК, ЯМР и др.).

По направлению 2. «Пространственное и электронное строение, атомно-молекулярные параметры изолированных атомов, ионов, молекул; структура и свойства ван-дер-ваальсовых молекул, комплексов, кластеров, ассоциатов; структура и свойства жидкостей...» диссертация посвящена детальному анализу пространственного и электронного строения нековалентно связанных комплексов и кластеров различной природы (нейтральные и ионные системы, молекулярные кристаллы, ассоциаты в растворах.). На основе квантово-химических расчетов и топологического анализа электронной плотности получены количественные характеристики межмолекулярных взаимодействий и исследовано влияние конденсированного состояния и внешней среды на структуру, энергию и спектроскопические проявления этих контактов.

По направлению 3. «Молекулярная динамика, межмолекулярные потенциалы и молекулярная организация веществ; компьютерная молекулярная динамика как метод диагностики структуры и динамики веществ; динамика фазовых переходов» в работе применены методы *ab initio* молекулярной динамики и классической молекулярной динамики. На основе моделирования изучены распределения структурных параметров, флуктуации длин водородных и других нековалентных связей, динамика сетей межмолекулярных взаимодействий что позволяет описывать молекулярную организацию и микроскопические механизмы релаксационных процессов и локальных структурных перестроек.

По направлению 4. «Энергетическая динамика и селективное заселение электронных, колебательных и вращательных состояний; межмолекулярный энергетический обмен; энергетика химических реакций и механизмы запасания энергии в молекулах» в работе проанализирована энергетика нековалентных взаимодействий и энергетические профили процессов ассоциации и диссоциации комплексов, включая вклад электростатического, индукционного, дисперсионного и обменного взаимодействий, а также роль кооперативных и антикооперативных эффектов. Рассматриваются механизмы перераспределения энергии между различными внутримолекулярными и межмолекулярными степенями свободы в системах с разветвленной сетью нековалентных контактов и их отражение в ИК- и ЯМР-спектрах.

По направлению 5. «Поверхности потенциальной энергии химических реакций и квантовые методы их расчета; динамика движения реагентов на потенциальной поверхности» с использованием квантово-химических методов рассчитаны поверхности потенциальной энергии для процессов формирования и разрушения различных типов нековалентных взаимодействий в газовой и конденсированной фазах. Полученные профили и характеристики переходных состояний сопоставлены с экспериментальными и независимо вычисленными спектральными данными, что позволяет проводить физически обоснованную интерпретацию полос в ИК-спектрах, химических сдвигов и констант спин-спинового взаимодействия в ЯМР-спектрах и связывать наблюдаемые спектральные характеристики с топологией потенциальных поверхностей.

В работе последовательно рассматриваются физико-химические механизмы, энергетика и спектральные проявления водородных, галогенных и других нековалентных связей, развиваются подходы к построению и анализу потенциальных поверхностей, ядерной динамики и спектральных характеристик, что соответствует тематике современной химической физике в её математически строгой постановке и обосновывает отнесение полученных результатов к области физико-математических наук.

Таким образом, диссертационная работа по своему содержанию, применяемым методам и полученным результатам в полной мере соответствует области исследований и направлениям, определенным паспортом научной специальности 1.3.17 - «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (отрасль науки – физико-математические), в части химической физики атомно-молекулярных систем и конденсированных сред.

3. В качестве *ведущей организации* назначить Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН), г. Казань.

4. В качестве *официальных оппонентов* назначить:

доктора физико-математических наук **Ананьева Ивана Вячеславовича**, ведущего научного сотрудника, заведующего лабораторией квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН), г. Москва;

доктора физико-математических наук **Ходова Илью Анатольевича**, ведущего научного сотрудника лаборатории функциональных нанокompозитов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), г. Москва;

доктора химических наук **Кеткова Сергея Юлиевича**, заведующего лабораторией Цифровой и структурной химии металлокомплексов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук (ИМХ РАН), г. Нижний Новгород.

5. Разрешить рассылку автореферата диссертации **Тупикиной Елены Юрьевны** в соответствии с утвержденным списком рассылки диссертационного совета по специальности 1.3.17 - «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

6. Назначить дату защиты диссертации на «21» октября 2026 года в 15:00.

7. Размещать на официальном сайте ИХКГ СО РАН, в ФИС ГНА документы и материалы аттестационного дела соискателя в соответствии с требованиями Минобрнауки России.

Решение по пп. 1-7 принимается открытым голосованием единогласно.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., доцент

Ученый секретарь диссертационного совета
к.х.н.



А.А. Онищук

И.П. Поздняков

17.07.2026 г.