

Сведения об оппоненте

по 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» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности

1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Фамилия Имя Отчество	Ананьев Иван Вячеславович
Ученая степень, шифр и название специальности (которые были получены при защите), ученое звание	Доктор физико-математических наук, 1.4.4 – Физическая химия
Основное место работы (полное и сокращенное наименование организации в соответствии с уставом), почтовый адрес	Федеральное Государственное Бюджетное Учреждение Науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук, ИОХ РАН, г. Москва, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31
Должность, подразделение	Ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией Квантовой химии
Почтовый адрес оппонента (можно указывать адрес места работы, указать индекс)	119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31
Телефон	+7 (495) 952-07-87
Адрес электронной почты	i.ananyev@gmail.com

Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)

1. 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 Ph₂Te₂-1,4-C₆F₄I₂. *Crystengcomm* **2022**, 24 (7), 1442–1452
2. Ananyev, I. V.; Fershtat, L. L. Why Pay More? QTAIM Descriptors of Non-Covalent Interactions in S22 from Promolecular Electron Density. *Mendeleev Communications* **2023**, 33 (6), 806–808
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**, 159 (12), 124113
4. 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**, 123 (9), e27082
5. 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**, 33 (3), 353–356
6. Ananyev, I. V.; Fershtat, L. L. Probing Transferability of Intermolecular Interactions by Their Features: A Nitro Group Case Study. *Mendeleev Communications* **2024**, 34 (4), 540–542.
7. Kinzhalov, M. A.; Kinzhalova, E. I.; Karnoukhova, V. A.; Ananyev, I. V.; Gomila, R. M.; Frontera, A.; Kukushkin, V. Y.; Bokach, N. A. Triiodide-Based Chair-Like Copper Complex Assembled by Halogen Bonding. *Inorganic Chemistry* **2024**, 63 (1), 191–202
8. Anisimov, A. A.; Bovkunova, A. A.; Dubasova, E. V.; Gontcharenko, V. E.; Taydakov, I. V.; Bazhina, E. S.; Eremenko, I. L.; Ananyev, I. V. Metal Coordination-Driven Photochromism in Schiff Bases Incorporating 1,2,4-Triazole and Hydroxyphenyl Moieties. *CrystEngComm* **2025**, 27 (48), 7944–7956

9. Kosareva, E. K.; Dubasova, E. V.; Dmitriev, M. V.; Meerov, D. B.; Kotov, N. O.; Dalinger, I. L.; Ananyev, I. V.; Muravyev, N. V. From Disappearing Polymorphs to Local Anisotropy of Mechanical Properties: Decoding Impact Sensitivity of 3,4-Dinitro-1H-Pyrazole-1,5-Diamine. *Crystal Growth & Design* **2025**, 25 (23), 10124–10133
10. Romanenko, A. S.; Ananyev, I. V. Critical Assessment of QTAIM Descriptors of Intermolecular Interactions at the Promolecular Level. *Structural Chemistry* **2025**, 36 (5), 1649–1666
11. Kosareva, E.; Dubasova, E. V.; Gainutdinov, R.; Dalinger, I. L.; Pivkina, A. N.; Meerov, D. B.; Ananyev, I. V.; Muravyev, N. V. Exploring the Relationship between Micromechanical Properties and Impact Sensitivity of Energetic Materials. *Crystal Growth & Design* **2026**, 26 (6), 2288–2299
12. Muravyev, N. V.; Fershtat, L. L.; Dalinger, I. L.; Suponitsky, K. Y.; Ananyev, I. V.; Melnikov, I. N. Rational Screening of Cocrystals Using Thermal Analysis: Benchmarking on Energetic Materials. *Crystal Growth and Design* **2022**, 22 (12), 7349–7362
13. Kosareva, E. K.; Gainutdinov, R. V.; Michalchuk, A. A. L.; Ananyev, I. V.; Muravyev, N. V. Mechanical Stimulation of Energetic Materials at the Nanoscale. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2022**, 24 (15), 8890–8900
14. Stebletsova, I. A.; Larin, A. A.; Matnurov, E. M.; Ananyev, I. V.; Babak, M. V.; Fershtat, L. L. Exploring the Anticancer Potential of NO-Donor Oxadiazole Assemblies Against Malignant Pleural Mesothelioma. *Pharmaceutics* **2025**, 17 (2), 230
15. Dubasova, E. V.; Anisimov, A. A.; Bolshakov, K. M.; Larin, A. A.; Svitanko, I. V.; Fershtat, L. L.; Ananyev, I. V. Diving Deep into the Difference between Two Independent Molecules: The Case Study of 3-((3,3-Dinitroazetidinyl)diazenyl)-5-(trifluoromethyl)-1H-1,2,4-triazole. *Crystal Growth and Design* **2026**, 26 (13), 5138–5149


/И.В. Ананьев/
Подпись

« 3 » июля 2026 г.

Верно.

Ученый секретарь Федерального Государственного Бюджетного Учреждения Науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук


/Г.Е. Марьина/
Подпись
(М.Е.)