ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.150.01 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ ИМ. В. В. ВОЕВОДСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело №_____
решение диссертационного совета от 21.10.2026, № 15

О присуждении Тупикиной Елене Юрьевне, гражданину Российской Федерации, учёной степени доктора физико-математических наук.

Диссертация ***«Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики»*** в виде рукописи по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» принята к защите 17 июля 2026 г., протокол № 12, диссертационным советом 24.1.150.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, приказ о создании диссертационного совета № 1511/нк-от 25.11.2016 года.

Соискатель, ***Тупикина Елена Юрьевна***, 1992 года рождения, на момент защиты диссертации работает в должности доцента Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Института химии, кафедры физической органической химии.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Институт химии, кафедра физической органической химии.

Научный консультант – академик РАН, доктор химических наук, профессор Санкт-Петербургского государственного университета ***Кукушкин Вадим Юрьевич***.

Официальные оппоненты:

1. ***Ананьев Иван Вячеславович****,* доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией Квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук;
2. ***Ходов Илья Анатольевич***, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории функциональных нанокомпозитов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук**;**
3. ***Кетков Сергей Юлиевич***, доктор химических наук, заведующий лабораторией Цифровой и структурной химии металлокомплексов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук;

дали ***положительные отзывы*** на диссертацию.

Ведущая организация, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук» (ФИЦ КазНЦ РАН), в своём **положительном заключении**, подписанном доктором химических наук, главным научным сотрудником лаборатории Радиоспектросокпии ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН ***Латыповым Шамилем Камильевичем***, утверждённом и.о. директора ФИЦ КазНЦ РАН членом-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук Калачёвым Алексеем Алексеевичем, указала, что данная диссертационная работа соответствует требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённом

Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в текущей редакции), а её автор, Тупикина Е.Ю., заслуживает присвоения ей искомой учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

В положительном заключении ведущей организации имеются следующие замечания и вопросы.

1. В работе используются определенные протоколы-приближения для расчетов ЯМР параметров для возможных вариантов связывания, чтобы далее сделать вывод об применимости/информативности этого маркера для анализа характера (геометрии/энергии) нековалентной связи. На самом деле, как на этапе разработки теории ХС (КССВ) ЯМР, так и ее имплементации в рамках различных расчетных схем используются определенные упрощения. Более того, сама ТФП, по сути, имеет много элементов «эмприки» и параметризации. Поэтому вопрос применимости того или иного подхода (функционал, базис, метод коррекции систематических ошибок особенно в низкопольной области и т.д.) для оценки ЯМР параметров является критичным и требует тщательной проверки. Поэтому было бы логично в работе сначала четко обосновать применимость используемого приближения для оценки конкретного спектрального параметра для обычных систем, не усложненных нековалентными взаимодействиями.
2. В разделе 2.1.1 - "Корреляции типа «спектр–структура» и «спектр–прочность» для модельных систем с водородными связями типа F–H· · ·F" автор обнаружил, что зависимость $\Delta\delta_H$ как функция координаты переноса протона q_1 имеет гауссову форму (Рис. 2.3). Однако, с учетом специфичной зависимости между суммарной длиной водородной связи q_2 и координаты асимметрии q_1 (Рис. 2.1), вполне можно ожидать более простой (линейной) зависимости между $\Delta\delta_H$ и длиной водородной связи q_2. Почему не рассмотрен этот вариант?

3. В разделе 2.1.3 для комплексов $(FHF)^-$, $(H_5O_2)^+$ и $(PyHPy)^+$ автор обнаружил существенную в шкале ^1H ХС разницу (до ~0.5 м.д.) между значениями, полученными по схеме Леви–Леблона (ReSpect) и полностью нерелятивистским результатом (Gaussian). В принципе, метод Леви–Леблона является также полностью нерелятивистским. Чем может быть обусловлено такое расхождение?
4. Почему вообще возникла идея оценки релятивистских эффектов для комплексов $(FHF)^-$, $(H_5O_2)^+$ и $(PyHPy)^+$? В действительности, в этих системах нет откровенно «тяжелых» ядер, которые могли бы быть источником SO-эффектов? Что мотивировало автора провести дополнительные достаточно специфичные расчеты, хотя ничто не предвещало наличия таких эффектов.
5. В разделе 2.1.5 для комплексов фосфинселенидов (R_3PSe) с галогенной связью (Br/I· · ·Se) проведен анализ расчетных δ(^{31}P) и δ(^{77}Se) на предмет их использования как диагностический инструмент для характеристики таких связей. В данных системах уже бром является достаточно тяжелым атомом, а йод тем более, и вполне естественно ожидать существенных релятивистских эффектов как на ХС фосфора, так и селена. Почему в данном случае не оценили релятивистскую поправку, хотя через анализ механизма передачи SO-эффектов на δ(^{31}P) и δ(^{77}Se) можно получить информацию о характере этих галогенных связей?
6. К сожалению, нет примера реальной биологической сложной системы, где было бы показано, что применение полученных протоколов и корреляций для оценки экспериментальных (спектральных) параметров дало новые знания об структуре каких-то специфичных нековалентных связей и их энергий, которые были недоступны до этого обычными имеющимся инструментарием.

Несмотря на то, что в целом диссертация и автореферат написаны хорошо и читаются достаточно легко, автор иногда использует англицизмы ("лакуны", "солют" и т.д.), которые явно можно и нужно было избежать.

При подготовке работы явно не обошлось без использования программ-переводчиков, которые оставили свой специфичный след. Например, "Квантово-химические расчёты щитований" (Стр. 36); " «якорят» форму полученных корреляций ...., определяющих величину химического сдвига мостающего протона" (Стр 100) и т.д.

Обнаружилась некоторая не строгость в изложении автореферата. Например, по всему тексту нет ни одной ссылки на приведенные рисунки. В каких-то случаях удается более-менее легко связать текст с конкретным рисунком, а в некоторых не очень. Например, Рисунок 10 - осталось не понятно, где в тексте он обсуждается и что он иллюстрирует.

В работе также не обошлось без опечаток. Например, в автореферате фрагмент текста «Методология и методы исследования» (89 строк) полностью повторяется дважды на страницах 3-4 и 9-10.

Соискатель имеет 62 научные работы (из них 24 по теме диссертации), опубликованных в отечественных и международных рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК. Личный вклад соискателя в опубликованные работы является определяющим и состоит в постановке задач, разработке методологии и расчётных протоколов, выполнении квантово-химических и молекулярно-динамических расчётов лично либо организации их выполнения под своим научным руководством, анализе и интерпретации результатов, построении ключевых спектрально-структурно-энергетических корреляций и формулировании выводов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Cooperativity of hydrogen bonds in biomolecular systems and their influence on structure and function / **E. Yu. Tupikina** // Coord. Chem. Rev. — 2026. — Vol. 549. — Article 217378.

2. Deconstructing ^{1}H NMR Chemical Shifts in Strong Hydrogen Bonds: A Computational Investigation of Solvation, Dynamics, and Nuclear Delocalization Effects / M. V. Kaplanskiy, D. A. Shitov, P. M. Tolstoy, **E. Yu. Tupikina** // J. Chem. Inf. Model. — 2025. — Vol. 65, N 10. — P. 5019–5034.
3. Spectral–Structural Correlations in NHN, OHO, and NHO Hydrogen Bonds: Accounting for Quantum Delocalization of the Bridging Proton via One-Dimensional Schrodinger Equation Solutions / M. V. Kaplanskiy, **E. Yu. Tupikina** // J. Comput. Chem. — 2025. — Vol. 46, N 31. — Article e70282.
4. Mutual influence of non-covalent interactions formed by imidazole: A systematic quantum-chemical study / D. A. Shitov, D. V. Krutin, **E. Yu. Tupikina** // J. Comput. Chem. — 2024. — Vol. 45, N 13. — P. 1046–1060.
5. Evolution of vibrational bands upon gradual protonation/deprotonation of arsinic acid $H_2As(O)OH$ in media of different polarity / **E. Yu. Tupikina**, V. O. Korostelev, D. V. Krutin, P. M. Tolstoy // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2023. — Vol. 25. — P. 8664–8675.
6. IR and NMR Spectral Diagnostics of Hydrogen Bond Energy and Geometry / P. M. Tolstoy, **E. Yu. Tupikina** // Spectroscopy and Computation of Hydrogen-Bonded Systems / eds. M. J. Wojcik, Y. Ozaki. — Wiley-VCH, 2023. — Chapter 12.
7. Non-covalent interactions in the glutathione peroxidase active center and their influence on the enzyme activity / **E. Yu. Tupikina** // Org. Biomol. Chem. — 2022. — Vol. 20. — P. 5551.
8. Estimations of FH···X hydrogen bond energies from IR intensities: Iogansen's rule revisited / **E. Yu. Tupikina**, P. M. Tolstoy, A. A. Titova, M. A. Kostin, G. S. Denisov // J. Comput. Chem. — 2021. — Vol. 42, N 8. — P. 564–571.
9. On the influence of water molecules on the outer electronic shells of R–SeH, $R–Se^-$ and R-SeOH fragments in the selenocysteine amino acid residue / **E.**

Yu. Tupikina, V. V. Karpov, P. M. Tolstoy // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2021. — Vol. 23, N 25. — P. 13965–13970.

10. Anticooperativity of FH···Cl $^-$ hydrogen bonds in $[(FH)_nCl]^-$ clusters (n = 1…6) / **E. Yu. Tupikina**, G. S. Denisov, P. M. Tolstoy // J. Comput. Chem. — 2019. — Vol. 40. — P. 2858–2867.
11. Correlations of NHN hydrogen bond energy with geometry and ^{1}H NMR chemical shift difference of NH protons for aniline complexes / **E. Yu. Tupikina**, M. Sigalov, I. G. Shenderovich, V. V. Mulloyarova, G. S. Denisov, P. M. Tolstoy // J. Chem. Phys. — 2019. — Vol. 150. — Article 114305.
12. New look at the Badger–Bauer rule: spectroscopic diagnostics of hydrogen bond by vibrational local modes and NMR parameters. FHF complexes / **E. Yu. Tupikina**, G. S. Denisov, S. M. Melikova, S. Yu. Kucherov, P. M.

На автореферат диссертации поступило 8 отзывов. Все отзывы положительные, из них шесть содержат замечания. Отзывы поступили от:

- ***Ивашкевича Олега Анатольевича***, доктора химических наук, академика НАН Беларуси, главного научного сотрудника БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», ***Матулиса Виталия Эдвардовича***, доктора химических наук, профессора кафедры неорганической химии химического факультатета Белорусского государственного университета;
- ***Разумова Владимира Фёдоровича***, доктора физико-математических наук, профессора, члена-корреспондента РАН, заведующего лабораторией фотоники наноразмерных структур Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН;
- ***Ястребова Сергея Гурьевича***, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника Федерального государственного

бюджетного учереждения науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН;

- ***Барташевич Екатерины Владимировны***, доктора химических наук, профессора кафедры теоретической и прикладной химии, ведущего научного сотрудника, заведующей НИЛ многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»;
- ***Адонина Сергея Александровича***, доктора химических наук, профессора РАН, заместителя директора по научной работе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН»;
- ***Ананикова Валентина Павловича***, академика РАН, доктора химических наук, заведующего лабораторией металлокомплексных и наноразмерных катализаторов Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, ***Дьяконова Владимира Анатольевича***, профессора РАН, доктора химических наук, руководителя группы «Лаборатория металлорганического синтеза и катализа»;
- ***Сабирова Дениса Шамилевича,*** доктора химических наук, главного научного сотрудника лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учереждения «Уфимский федеральный исследовательский центра Российской академии наук»;
- ***Ломоносова Игоря Владимировича***, доктора физико-математических наук, члена-корреспондента РАН, руководителя научного направления «экстремальные состояния вещества» Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской физики РАН.

Все 8 поступивших отзывов содержат положительную оценку диссертационной работы. Отзывы ***С. А. Адонина*** и ***И. В. Ломоносова*** не содержит замечаний. В остальных отзывах высказаны следующие основные вопросы и замечания:

1. О границах применимости линейных зависимостей энергии комплексообразования от протонного химического сдвига, особенно для предельно прочных квазисимметричных водородных связей (***В. П. Анаников, В. А. Дьяконов***); о физических и математических критериях переносимости корреляций на системы с несколькими взаимовлияющими контактами и об обоснованности совместного корреляционного описания слабых и прочных водородных связей (***Д. Ш. Сабиров***).
2. О статистической значимости и устойчивости корреляций при небольших выборках модельных комплексов (***С. Г. Ястребов***); об устойчивости решения двумерной обратной спектральной задачи к экспериментальным погрешностям химических сдвигов и динамическим флуктуациям геометрии в растворах (***В. П. Анаников, В. А. Дьяконов, В. Ф. Разумов***); о критериях выбора дополнительных ЯМР-наблюдаемых для обеспечения единственности решения (***О. А. Ивашкевич, В. Э. Матулис***).
3. О необходимости более подробного описания влияния растворителя и белкового окружения на переносимость корреляций и количественные энергетические оценки в биомолекулярных системах (***С. Г. Ястребов***), а также о температурных и концентрационных границах применимости фосфинселенидов как ЯМР-зондов в конкурирующих полярных растворителях (***О. А. Ивашкевич, В. Э. Матулис***).
4. О влиянии выбора обменно-корреляционного функционала на профиль поверхности потенциальной энергии переноса протона (***О. А. Ивашкевич, В. Э. Матулис***); о конкретизации использованных

функционалов, дисперсионных поправок и способов учёта релятивистских эффектов, а также о разграничении направленного и неспецифического вкладов в слабые взаимодействия (***В. Ф. Разумов***). Отдельно поставлены вопросы о критериях и процедурах учёта ошибки суперпозиции базисных функций при описаний энергий антикооперативности и построении потенциальных поверхностей (***С. Г. Ястребов, В. Ф. Разумов***).

5. О наличии аналогичных выявленному в РНКазе А пниктогенных контактов в других фосфат-трансферазных ферментах (***В. П. Анаников, В. А. Дьяконов***) и о возможности применения результатов работы к анализу связи токсичности соединений дейтерия с нарушением кинетической кооперативности в механизме Гротгуса (***О. А. Ивашкевич, В. Э. Матулис***).
6. О необходимости уточнения соотношения терминов «нековалентная связь», «нековалентное взаимодействие» и «нековалентный контакт» (***Е. В. Барташевич***). Кроме того, отмечены недостаточная детализация расчётных и экспериментальных условий в автореферате, в частности отсутствие указания методов расчёта в подписях к графикам и рабочих частот ЯМР-приборов, а также отдельные опечатки и технические недостатки оформления (***О. А. Ивашкевич, В. Э. Матулис, С. Г. Ястребов, В. Ф. Разумов***).

Авторы отзывов отмечают, что высказанные вопросы и замечания **не снижают** общей положительной оценки диссертационной работы. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Тупикиной Е.Ю. **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК предъявляет к докторским диссертациям, а её автор – Тупикина Е.Ю. – заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обусловлен их компетентностью в области химической физики молекулярных систем, квантово-химического анализа нековалентных взаимодействий и ИК- и ЯМР-спектроскопии, подтверждаемой публикациями по указанным направлениям, в том числе по тематике диссертационного исследования, в ведущих российских и международных научных изданиях.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- установлены количественные корреляции между геометрическими параметрами, энергиями комплексообразования и ИК- и ЯМР-характеристиками широкого класса водородных связей в диапазоне энергий 0.2–47 ккал/моль; показано, что силовые постоянные и интенсивности колебательных полос, а также их комбинации с частотами позволяют расширить возможности спектральной диагностики геометрии и прочности водородных связей;
- количественно оценены вклады сольватации, ядерной динамики и квантовой делокализации мостикового протона в химические сдвиги прочных водородных связей; разработан многоуровневый вычислительный протокол, позволяющий воспроизводить экспериментальные протонные химические сдвиги с точностью порядка 1 м.д. в случае прочных водородых связей;
- разработан и реализован алгоритм решения двумерной обратной спектральной задачи для двух взаимовлияющих водородных связей; на примере комплексов аниона 4-гидроксипиридина показана возможность восстановления координат переноса протона по совокупности ЯМР-параметров с погрешностью порядка 0.04 Å;
- охарактеризованы фосфинселениды как ЯМР-зонды водородных и галогенных связей; установлены зависимости химических сдвигов и

констант спин-спинового взаимодействия от геометрических характеристик соответствующих контактов;

- установлены закономерности кооперативного и антикооперативного влияния нековалентных взаимодействий на геометрию, энергетику и спектральные характеристики молекулярных систем; показана возможность направленного изменения σ-дырочного потенциала атомов галогена посредством координации фрагмента $Cr(CO)_3$ к ароматическому кольцу;
- показана роль разветвлённых сетей нековалентных взаимодействий в стабилизации каталитически значимых состояний активных центров глутатионпероксидазы 1 и рибонуклеазы А; выявлен пниктогенный контакт между атомом азота His119 и кислородом фосфатного фрагмента, участвующий в перераспределении электронной плотности и взаимосвязанный с соседними водородными связями.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что в результате выполненной работы развиты количественные представления о взаимосвязи электронной структуры, геометрии, энергетики и спектральных характеристик водородных и других нековалентных взаимодействий. Установлена роль сольватации, ядерной динамики и квантовой делокализации мостикового протона в формировании протонных химических сдвигов прочных водородных связей. Разработан подход к решению многомерной обратной спектральной задачи и уточнены условия переносимости корреляций от изолированных контактов к системам с несколькими взаимовлияющими взаимодействиями. Полученный массив данных может служить основой для дальнейшего развития теоретических моделей нековалентных взаимодействий.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики заключается в разработке калиброванных корреляций и спектральных дескрипторов, позволяющих по ИК- и ЯМР-данным

количественно оценивать геометрию и прочность нековалентных взаимодействий в пределах установленных областей применимости. Полученные зависимости могут использоваться для интерпретации спектров молекулярных комплексов, проверки и калибровки потенциалов молекулярной динамики, а также рационального подбора молекулярных фрагментов при разработке функциональных материалов, каталитических систем и биологически активных соединений. Сформированные массивы согласованных структурных, энергетических и спектральных данных могут служить обучающими наборами для моделей машинного обучения и использоваться в научно-исследовательской и образовательной практике.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что сделанные выводы и полученные научные результаты основаны на квалифицированном применении современных методов квантовой химии и молекулярной динамики, дополненных анализом электронной плотности и разложением энергии взаимодействия. Надёжность расчётных данных обеспечена контролем сходимости по базисному набору, учётом ошибки суперпозиции базисных функций там, где это необходимо, и сопоставлением с доступными независимыми экспериментальными ИК- и ЯМР-данными, если они доступны. Проведён статистический анализ построенных корреляций; проверена возможность использования предложенных дескрипторов на системах, не использованных при их калибровке. Основные результаты опубликованы в рецензируемых научных изданиях и неоднократно обсуждались на российских и международных конференциях и научных семинарах по физической химии, квантовой химии, спектроскопии и молекулярному моделированию.

Личный вклад соискателя состоит в постановке научных задач, выборе модельных систем и исследуемых дескрипторов, разработке методологии, расчётных протоколов и схем вычислительных экспериментов. Квантово-химические расчёты и молекулярно-динамическое моделирование выполнялись соискателем лично либо студентами и аспирантами под его

научным руководством. В последнем случае соискатель обеспечивал выбор методики, постановку вычислительных серий, контроль корректности расчётов, обработку и интерпретацию результатов, а также формулирование выводов. Все ключевые спектрально-структурно-энергетические корреляции и их физико-химическая интерпретация подготовлены соискателем. Собственный экспериментальный вклад заключается в измерении констант спин–спинового взаимодействия $^{1}J_{CH}$ в растворах комплексов 1,1-динитроэтана и их сопоставлении с результатами квантово-химических расчётов; остальные экспериментальные данные, использованные для проверки и калибровки моделей, получены коллегами-соавторами.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченное исследование, посвящённое актуальной проблеме количественного описания структуры, энергетики и спектральных проявлений нековалентных взаимодействий в модельных и биомолекулярных системах. Полученные результаты имеют фундаментальную и практическую значимость. Содержание работы соответствует научной специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (отрасль науки – физико-математические) по направлениям 1–5 паспорта специальности в части атомно-молекулярной структуры и динамики элементарных процессов, пространственного и электронного строения молекулярных комплексов и кластеров, молекулярной динамики, энергетики взаимодействий, расчёта поверхностей потенциальной энергии и спектроскопии молекулярных систем.

Соискатель Тупикина Е. Ю. дала содержательные и аргументированные ответы на вопросы участников заседания, а также на замечания официальных оппонентов, ведущей организации и авторов отзывов на автореферат. В ответах были уточнены физические основания предложенных подходов, границы применимости корреляционных зависимостей и особенности

интерпретации полученных результатов. Соискатель согласилась с замечаниями технического и редакционного характера

На заседании 21 октября 2026 г. диссертационный совет постановил: за разработку и обоснование подхода к количественному описанию структуры, прочности и спектральных проявлений нековалентных взаимодействий в модельных и биомолекулярных системах, обеспечивающего решение обратных спектральных задач с учётом кооперативных эффектов, сольватации и ядерной динамики, присудить ***Тупикиной Елене Юрьевне*** учёную степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 10 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании и голосовании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени - 17, против присуждения учёной степени - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета,

д-р хим. наук, доцент Онищук Андрей Александрович

Ученый секретарь диссертационного совета,

канд. хим. наук Поздняков Иван Павлович

22.10.2026 г.