

Сведения о ведущей организации  
по диссертационной работе Шевченко Александра Петровича  
**«Теория и методы компьютерного геометрико-топологического анализа и**  
**прогнозирования строения и физических свойств координационных соединений»,**  
представленной на соискание ученой степени доктора химических наук  
по специальности 1.4.4 Физическая химия

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмейнова Российской академии наук
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	ИНЭОС РАН
Полное наименование факультета и кафедры	Лаборатория рентгеноструктурных исследований
Почтовый индекс, адрес организации	119334, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1
Веб-сайт	<a href="https://ineos.ac.ru/">https://ineos.ac.ru/</a>
Телефон	+7 (499) 135-92-02
Адрес электронной почты	larina@ineos.ac.ru
Список основных публикаций работников структурного подразделения, составляющего отзыв, за последние пять лет по теме диссертации (не более 15 публикаций)	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Володин А.Д., Головешкин А.С., Буйкин П.А., Куликова Е.С., Корлюков А.А. Кристаллическое строение элсульфавирина, комплекса его натриевой соли с 15-краун-5 и его активной формы // Журнал структурной химии, 2025, 66(3), 141924. <a href="http://dx.doi.org/10.26902/jsc_id141924">http://dx.doi.org/10.26902/jsc_id141924</a></li><li>2. Repina O.V., Kubasov A.S., Vologzhanina A.V., Borisov A.V., Kritchakov I.S., Voroshilkina K.M., Nazarov A.A., Shchevnikov D.M., Grudova M.V., Gomila R.M., Frontera A., Nenajdenko V.G., Kritchakov A.S., Tskhovrebov A.G. Au<sup>III</sup> Acyclic (Amino)(N-Pyridinium)carbenoids: Synthesis via Addition of 2-PySeCl to AuI-Bound Isonitriles, Structures, and Cytotoxicity // International Journal of Molecular Sciences, 2025, 26(2), 483. <a href="http://dx.doi.org/10.3390/ijms26020483">http://dx.doi.org/10.3390/ijms26020483</a></li><li>3. Vologzhanina A.V. Atomic and molecular volumes from three crystal tessellations: a comparison of the QTAIM, Hirshfeld, and Voronoi data // Structural Chemistry, 2025, 36(1), 113-123. <a href="http://dx.doi.org/10.1007/s11224-024-02426-x">http://dx.doi.org/10.1007/s11224-024-02426-x</a></li><li>4. Voronin A.P., Ramazanova A.G., Churakov A.V., Vologzhanina A.V., Kulikova E.S., Perlovich G.L. Virtual Screening, Polymorphism, and Formation Thermodynamics Study of Riluzole Multicomponent Crystals with Dihydroxybenzoic Acids // Crystal Growth and Design, 2024, 24, 22, 9773-9789. <a href="https://doi.org/10.1021/acs.cgd.4c01278">https://doi.org/10.1021/acs.cgd.4c01278</a></li></ol>

5. Selikhov A.N., Félix G., Lyubov D.M., Nelyubina Y.V., Cherkasov A.V., Sene S., Taydakov I.V., Metlin M.T., Tyutyunov A.A., Guari Y., Larionova J., Trifonov A.A. Luminescent Er<sup>3+</sup> based single molecule magnets with fluorinated alkoxide or aryloxide ligands // Dalton Transactions, 2024, 53(14), 6352-6366. <http://dx.doi.org/10.1039/d3dt04375d>
6. Володин А.Д., Вологжанина А.В., Пересыпкина Е.В., Корлюков А.А. Конформационный полиморфизм натриевой соли эльсульфавирина // Журнал структурной химии, 2024, 65(2), 123238. [http://dx.doi.org/10.26902/jsc\\_id123238](http://dx.doi.org/10.26902/jsc_id123238)
7. Bazhina E.S., Bovkunova A.A., Shmelev M.A., Korlyukov A.A., Pavlov A.A., Hochvaldová L., Kvítek L., Panáček A., Kopel P., Eremenko I.L., Kiskin M.A. Zinc(II) and copper(II) complexes with N-substituted imines derived from 4-amino-1,2,4-triazole: Synthesis, crystal structure, and biological activity // Inorganica Chimica Acta, 2023, 547, 121359. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ica.2022.121359>
8. Zorina-Tikhonova E.N., Chistyakov A.S., Novikova V.A., Knyazev D.A., Gogoleva N.V., Blinou D.O., Efimov N.N., Dorovatovskii P., Kiskin M.A., Eremenko I.L., Vologzhanina A.V. Design and synthesis of copper(II) malonates with N,N'-containing linkers // CrystEngComm, 2023, 25, 2859-2870. <http://dx.doi.org/10.1039/d3ce00081h>
9. Serezhkina L.B., Vologzhanina A.V., Mitina D.S., Serezhkin V.N. New Monoiodoacetate Complexes of Uranyl: Synthesis and Structure // Radiochemistry, 2022, 64(6), 686-693. <http://dx.doi.org/10.1134/s1066362222060030>
10. Golovanov I.S., Leonov A.V., Lesnikov V.K., Pospelov E.V., Frolov K.V., Korlyukov A.A., Nelyubina Y.V., Novikov V.V., Sukhorukov A.Yu. Iron(iv) complexes with tetraazaadamantane-based ligands: synthesis, structure, applications in dioxygen activation and labeling of biomolecules // Dalton Transactions, 2022, 51(11), 4284-4296. <http://dx.doi.org/10.1039/d1dt04104e>
11. Ищенко А.А., Пак А.М., Нелюбина Ю.В. Исследование распределения электронной плотности в кристалле биосовместимого металл-органического координационного полимера // Координационная химия, 2022, 48(1), 18-28. <http://dx.doi.org/10.31857/s0132344x22010029>
12. Денисов Г.Л., Примаков П.В., Нелюбина Ю.В. Новый металл-органический координационный полимер – продукт сольвотермального синтеза в автоклавах, полученных методом 3D-печати // Координационная химия, 2021, 47(4), 218-225. <http://dx.doi.org/10.31857/s0132344x21040010>
13. Vologzhanina A.V., Ushakov I.E., Korlyukov A.A. Intermolecular Interactions in Crystal Structures of Imatinib-Containing Compounds // Int. J. Mol. Sci., 2020, 21 (23), 8970. <http://dx.doi.org/10.3390/ijms21238970>
14. Царюк В.И., Журавлев В.П., Шостак Р., Вологжанина А.В. Строение, люминисценция и КР-спектроскопия дипивалоилметанатов и других beta-дикетонатов европия и

	тербия с 2,2'-бипиридином // Журнал структурной химии, 2020, 61(7), 1088-1099. <a href="http://dx.doi.org/10.26902/JSC_id58713">http://dx.doi.org/10.26902/JSC_id58713</a>
	15. Korlyukov A.A., Malinska M., Vologzhanina A.V., Goizman M.S., Trzybinski D., Wozniak K. Charge density view on bicalutamide molecular interactions in the monoclinic polymorph and androgen receptor binding pocket // IUCrJ, 2020, 7(1), 71-82. <a href="http://dx.doi.org/10.1107/s2052252519014416">http://dx.doi.org/10.1107/s2052252519014416</a>