

СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по диссертации Герасимовой Дарьи Павловны на тему: «Экспериментальное и теоретическое исследование гомо- и гетерохирального типов связывания производных 5-гидрокси-3-пирролин-2-она», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Полное и сокращенное наименование организации	Почтовый адрес (индекс, город, улица, дом), телефон, адрес электронной почты, адрес официального сайта в сети «Интернет»	Сведения о лице, утвердившем отзыв			Основные работы работников ведущей организации по теме диссертации, опубликованные в рецензируемых научных журналах за последние 5 лет
		Фамилия Имя Отчество	Ученая степень	Должность	
<p>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»</p> <p>ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)", Южно-Уральский государственный университет</p>	<p>454080, г. Челябинск, просп. Ленина, 76 +7(351)267-99-00 info@susu.ru www.susu.ru</p>	Коржов Антон Вениаминович	Доктор технических наук	Первый проректор – проректор по научной работе	<p>1. Bartashevich E.V., Mukhitdinova S.E., Klyuev I.V., Tsirelson V.G. Parametric Evaluation of the Energy of Tetrel Bonds in Complexes of Tetrahedral Molecules with Ammonia and Halide Anions. <i>Russ. J. Phys. Chem.</i>, 2023, Vol. 97(11), P. 2449–2456.</p> <p>2. Bartashevich E.V., Levina E.O., Yushina I.D., Sozykin S.A., Tsirelson V.G. Electron delocalization in defect-containing graphene and its influence on tetrel bond formation. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i>, 2023, Vol. 25(36), P. 24342–24354.</p> <p>3. Borodina O.S., Bartashevich E.V., Ovchinnikova I.G., Fedorova O.V., Rusinov G.L. Evaluation of the effect of iminium intermediates on the stereoselectivity of the Biginelli reaction involving hydroxyproline-containing podands. <i>Russ. Chem. Bull.</i>, 2023, Vol. 72(8), P. 1767–1780.</p> <p>4. Matveychuk Y.V., Yurchenko A.S., Masunov A.E., Bartashevich E.V. Quantitative Comparison of Structural and Mechanical Properties of 6-Chloro-2,4-dinitroaniline Polymorphs. <i>Cryst. Growth Des.</i>, 2022, 22(11), 6472–6482.</p> <p>5. Gruzdev D.A., Vakarov S.A., Korolyova M.A., Bartashevich E.V., Tumashov A.A., Chulakov E.N., Ezhikova M.A., Kodess M.I., Levit G.L., Krasnov V.P. Acylative</p>
		Структурное подразделение, готовящее отзыв			
		НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов			
		Сведения о лицах, подготовивших отзыв			
		Барташевич Екатерина Владимировна	Доктор химических наук	Заведующий НИЛ, ведущий научный сотрудник, профессор кафедры Теорети-	

				<p>ческой и прикладной химии</p>	<p>kinetic resolution of racemic methyl-substituted cyclic alkylamines with 2,5-dioxopyrrolidin-1-yl (R)-2-phenoxypropanoate. <i>Org. Biomol. Chem.</i>, 2022, Vol. 20(4), P. 862–869.</p> <p>6. O. Borodina, I. Ovchinnikova, O. Fedorova, G. Makarov, E. Bartashevich. Effect of 4-Hydroxy-L-proline-containing podands on the stereoselectivity of Biginelli reaction according to molecular dynamics // <i>Comput. Theor. Chem.</i>, 2022, Vol. 1217. P. 113885.</p> <p>7. Bartashevich E.V., Mukhitdinova S.E., Tsirelson V.G. Bond orders and electron delocalization indices for S-N, S-C and S-S bonds in 1,2,3-dithiazole systems. <i>Mendeleev Commun.</i>, 2021, Vol. 31(5), P. 680–683.</p> <p>8. Yushina I., Krylov A., Leonidov I.I., Batalov V., Chen Y.S., Wang S.G., Stash A., Bartashevich E. The influence of chalcogen atom on conformation and phase transition in chalcogenazinoquinolinium monoiodides. <i>Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci.</i>, 2021, Vol. 77, P. 526–536.</p> <p>9. Borodina O., Ovchinnikova I., Makarov G., Yeltsov O., Titova Y., Fedorova O., Masunov A.E., Bartashevich E. Pseudocyclic Form of 4-Hydroxypyrrolidine-2-carboxanilide Podands with Trioxyethylene Chain: Modeling, Conformational Search, and NMR Analysis. <i>J. Phys. Chem. A</i>, 2021, Vol. 125(28), P. 6029–6041.</p> <p>10. Bol'shakov O.I., Yushina I.D., Stash A.I., Aysin R.R., Bartashevich E.V., Rakitin O.A. Structure and properties of 4-phenyl-5H-1,2,3-dithiazole-5-thione polyiodide with S-I+-S bridged complex. <i>Struct. Chem.</i>, 2020, 31(5), 1729–1737.</p>
--	--	--	--	----------------------------------	---

Заведующий НИЛ Многомасштабного моделирования
многокомпонентных функциональных материалов, д.х.н.

Первый проректор – проректор
по научной работе, д.т.н.

Е.В. Барташевич

А.В. Коржов