

Сведения об официальных оппонентах

по диссертации *Ковтуна Дмитрия Михайловича*

«Внутримолекулярная динамика и равновесная структура многоатомных молекул на основе адиабатической теории возмущений и методов решения некорректных обратных задач»

1. Ф.И.О.: Шлыков Сергей Александрович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: доцент

Научная специальность: физическая химия - 02.00.04

Должность: заведующий кафедрой, кафедра физической и коллоидной химии,

Место работы: ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»

Адрес места работы: 153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, 7.

Тел. : (4932) 32-73-97

E-mail: shlykov@isuct.ru

1. Pogonin A. E., Otlyotov A. A., Minenkov Y., Semeikin A. S., Zhabanov Y. A., **Shlykov S. A.**, Girichev G. V. Molecular structure of nickel octamethylporphyrin — rare experimental evidence of a ruffling effect in gas phase // *International Journal of Molecular Sciences*. — 2021. — Vol. 23, no. 1. — P. 320–320.
2. Phien T. D., Kuzmina L. E., Arnason I, Jonsdottir N. R., **Shlykov S. A.** The conformational behavior and structure of monosubstituted-1,3,5-trisilacyclohexanes: 1-n,n-dimethylamino-1,3,5-trisilacyclohexane // *Journal of Molecular Structure*. — 2021. — Vol. 1224. — P. 129046.
3. Belogolova E. F., **Shlykov S. A.**, Eroshin A. V., Doronina E. P., Sidorkin V. F. The hierarchy of ab initio and dft methods for describing an intramolecular non-covalent Si···N contact in the silicon compounds using electron diffraction geometries // *Physical Chemistry Chemical Physics*. — 2021. — Vol. 23, no. 4. — P. 2762–2774.
4. Eroshin A. V., Tran Dinh Phien, Weber P. M., **Shlykov S. A.** Conformational diversity of 1-phenylpiperidin-4-one in the gas phase // *Chemical Physics Letters*. — 2022. — V. 803. article no. 139851.
5. Shainyan B. A., Eroshin A. V., Mukhina V. A., **Shlykov S. A.** Gas-Phase Structure of 3.7.9-tris(trifluoromethylsulfonyl)-3.7.9-triazabicyclo[3.3.1]nonane by GED and Theoretical Calculations // *Molecules*. — 2023. — V. 28, no. 9. — article no. 3933.

2. Ф.И.О.: Беляков Александр Васильевич

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: физическая химия -02.00.04

Должность: заведующий кафедрой, кафедра общей физики

Место работы: ФГБОУ Санкт-Петербургский государственный Технологический институт (Технический университет)

Адрес места работы: 190013, Россия, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 24-26/49 литера А

Тел.: +7 (812) 494-9394

E-mail: physics_dept@technolog.edu.ru

1. **Belyakov A. V.**, Vogt N., Demaison J., Kulishenko R. Y., Oskorbin A. A. Semiexperimental equilibrium molecular structure of phthalic anhydride // *Chemical Physics Letters*. — 2022. — Vol. 1250. — Article No 131669.
2. Petrov M. L., Popova E. A., Krivchun M. N., **Belyakov A. V.** Synthesis and Structure of the Copper(II) Chloride Complex with (2-Bromophenyl)thioacetic Acid Morpholide // *Russian Journal of General Chemistry*. — 2020. — Vol. 90. — P. 858 — 862.
3. Zhurko, G. A., Fedorova, A. A., **Belyakov, A. V.** Computations of IR spectra of some transition metal carbonyls and model clusters of nickel oxide with carbon monoxide // *Journal of Molecular Structure*. — 2021. — Vol. 1241. — Article No. 130439
4. Savelev I. I., Efremova I. E., Lapshina L. V., Gurzhiy V. V., **Belyakov A. V.** Modified synthesis and structural features of 2-benzylidene-4-nitro-2,5-dihydrothiophene 1, 1-dioxides // *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. — 2021. — Vol. 57. — P. 861 — 865.
5. **Belyakov A. V.**, Kuznetsov V. V., Shimanskaya G. S., Rykov A. N., Goloveshkin A. S., Novakovskaya Y. V., Shishkov I. F. Molecular structure of 1,1',6,6'-tetraaza-7,7'- bi(bicyclo[4.1.0]heptane) in gas, solid, and liquid phases: GED, XRD and NMR data combined with quantum chemical calculations // *Mendeleev Communications*. — 2023. — Vol. 33, no.1. — P. 95–98.

3. Ф.И.О.: Палюлин Владимир Александрович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: доцент

Научная(ые) специальность(и): органическая химия - 02.00.03

Должность: Кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза, НИЛ медицинской химии, ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией

Место работы: МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет,

Тел.: (495) 939-39-69, (495) 939-35-57

E-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

1. Shaimardanov A. R., Shulga D. A., **Palyulin V. A.** On hidden anisotropy of formally charged fragments // *Journal of Computational Chemistry*. — 2023. — Vol. 44, no. 13. — P. 1312–1315
2. Pisarev S. A., **Palyulin V. A.** Conformational effects of 1,5,9-substitution in symmetric bicyclo[3.3.1]nonane analogues. // *Mendeleev Communications*. — 2021. — Vol. 31, no. 5. — P. 612–614.
3. Shulga D. A., Ivanov N. N., **Palyulin V. A.** Reverse fragment based drug discovery approach via simple estimation of fragment contributions // *Mendeleev Communications*. — 2021. — Vol. 31, no. 3. — P. 291–293.
4. Guseynov A.-A. D., Pisarev S. A., Shulga D. A., **Palyulin V. A.**, Fedorov M. V., Karlov D. S. Computational characterization of the glutamate receptor antagonist perampanel and its close analogs: density functional exploration of conformational

- space and molecular docking study // *Journal of Molecular Modeling*. — 2019. — Vol. 25. — P. 312.
5. Pisarev S. A., Shulga D. A., **Palyulin V. A.**, Zefirov N. S. Lone pairs vs. covalent bonds: conformational effects in bicyclo[3.3.1]nonane derivatives // *Structural Chemistry*. — 2019. — Vol. 30, no. 2. — P. 509–522

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.3,
И.О. Фамилия

М.И. Шилина

Подпись, печать