Сведения о ведущей организации

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.

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	ФИЦ КазНЦ РАН
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Тип организации	Научная организация
Наименование подразделения	Лаборатория радиоспектроскопии Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН
Почтовый индекс, адрес организации	420111, Казань, ул. Лобачевского, д. 2/31
Веб-сайт	https://knc.ru
Телефон	(843)231-90-00
Адрес электронной почты	presidium@knc.ru

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

1. Kondrashova S.A., Polyancev F.M., Latypov S.K. DFT Calculations of31 P NMR chemical shifts in palladium complexes // Molecules. – 2022. – Vol. 27, Is. 9. Art. 2668. DOI: 10.3390/molecules27092668
2. Kataeva O., Ivshin K., Metlushka K., Nikitina K., Khrizanforova V., Budnikova Y., Fayzullin R.R., Latypov S., Schiemenz S., Bretschneider M., Popov A., Avdoshenko S., Krupskaya Y., Büchner B., Knupfer M. New charge transfer cocrystals of F2 TCNQ with polycyclic aromatic hydrocarbons: acceptor-acceptor interactions and their contribution to supramolecular arrangement and charge transfer // Crystal Growth and Design. – 2022. – Vol. 22, Is. 1. – P. 751-762. DOI: 10.1021/acs.cgd.1c01255
3. Kondrashova S.A., Latypov S.K. DFT Approach for Predicting 13C NMR Shifts of Atoms Directly Coordinated to Pd // Organometallics. – 2023. – Vol. 42. – Is. 15. – P. 1951-1962. 10.1021/acs.organomet.3c00186
4. Kondrashova S.A., Latypov S.K. NMR "FingerPrints" of N-Heterocyclic Carbenes, DFT Analysis: Scopes and Limitations // Molecules. – 2023. – Vol. 28. – 7729. 10.3390/molecules28237729
5. Ivshin K.A., Metlushka K., Fedonin A., Latypov Sh.K., Khrizanforova V.V., Budnikova Yu.G., Vandyukov A.E., Kiiamov A.G., Laskin A., Avdoshenko S.M., Knupfer M., Kataeva O. Substituent Controllable Assembly of Anthracene Donors and TCNQ Acceptors in Charge Transfer Cocrystals // Crystal Growth & Design. – 2023. – Vol. 23. - Is. 2. – P. 954-964. 10.1021/acs.cgd.2c01146

6. Kondrashova S.A., Latypov S.K. DFT Approach for Predicting 13C NMR Shifts of Atoms Directly Coordinated to Pt: Scopes and Limitations // Molecules. – 2024. – Vol. 29. – Art. No. 6052. https://doi.org/10.3390/molecules29246052
7. Katsyuba S.A., Grimme S. Structure and intermolecular interactions in ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium bromide and its aqueous solutions investigated by vibrational spectroscopy and quantum chemical computations // Journal of Computational Chemistry – 2024. – Vol. 45, Is. 32. – P. 2719-2726. 10.1002/jcc.27472
8. Katsyuba S.A., Burganov T.I. Computationally assisted vibrational spectroscopy of nucleic acid bases. 2. Thymine // Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2024. – Vol. 309. – Art. No. 123832. 10.1016/j.saa.2023.123832
9. Fominykh O.D., Sharipova A.V., Balakina M.Yu. Atomistic modeling of chromophores orientation in the side-chains of methacrylic polymers in the applied electric field // Chemical Physics Letters. – 2025. – Vol. 877. – Art ID 142304. - doi.org/10.1016/j.cplett.2025.142304
10. Kondrashova S.A., Latypov S.K. DFT-Calculations of 31P NMR Chemical Shift of σ-Donor Phosphorus Atoms in Platinum Complexes // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2025. – Vol. 51, Is. 5. – P. 308-315. - 10.31857/S0132344X250506E4
11. Kondrashova S.A., Latypov S.K. Reliable DFT protocol for calculation of ^{195}Pt NMR chemical shifts// Russian Chemical Bulletin. – 2025. – Vol. 74. – P. 2970–2979. - doi.org/10.1007/s11172-025-4778-0
12. Кондрашова С.А., Латыпов Ш.К. ЯМР в структурном анализе дифосфанов R(H)PP(H)R: возможности и ограничения // Журнал структурной химии. – 2025. – Т. 66, №. 5. – Art ID 144520. - 10.26902/JSC_id144520
13. Kondrashova S. A., Latypov S. K. Quantum-Chemical Calculations of Direct Spin–Spin Coupling Constants ^{195}Pt–^{13}C in the Platinum Complexes: Possibilities and Limitations // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2025. – Т. 51. – №. 1. – С. 30-3610.31857/S0132344X25040025
14. Kondrashova S.A., Latypov Sh.K. Combined DFT protocol for the calculation of ^{31} P NMR shifts in platinum complexes // Dalton Transactions. - 2026. – Vol. 55, № 4. - P. 1781-1791. - 10.1039/d5dt02493e

Верно:

Директор ФИЦ КазНЦ РАН,
член-корреспондент РАН _____ А.А. Калачев

«8» 07 2026 г. (М.П.)

Главный научный сотрудник
Лаб. радиоспектроскопии, д.х.н. Ш.К. Латыпов