

## Сведения о ведущей организации

по диссертации Шелеповой Екатерины Алексеевны на тему «Исследование свободного объема в молекулярно-динамических моделях липидных мембран и ионных жидкостей» на соискание ученой степени кандидата 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 «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	ИК СО РАН
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Почтовый индекс, адрес организации	630090, г.Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 5
Веб-сайт	<a href="http://catalysis.ru/">http://catalysis.ru/</a>
Телефон	+7 (383) 330-67-71
Факс	+7 (383) 330-83-56
Адрес электронной почты	<a href="mailto:bic@catalysis.ru">bic@catalysis.ru</a>

*Список публикаций работников по теме диссертации за последние 5 лет:*

1. Prikhod'ko S.A.; Shabalin A.Y.; Shmakov M.M.; Bardin V.V.; Adonin N.Y. Ionic Liquids with Fluorine-Containing Anions as a New Class of Functional Materials: Features of the Synthesis, Physicochemical Properties, and Use // Russ. Chem. Bullet. – 2020. T. 69. – С. 17-31.
2. Ivanov M.Y.; Polienko Y.F.; Kirilyuk I.A.; Prikhod'ko S.A.; Adonin N.Y.; Fedin M.V. Peek Inside the Water Mixtures of Ionic Liquids at Molecular Level: Microscopic Properties Probed by EPR Spectroscopy. In Int. J. Mol. Sci., 2021; Vol. 22.
3. Prikhod'ko S.A.; Shabalin A.Y.; Adonin N.Y. New Catalytic Systems with Chemically Fixed Nickel Complexes in the Reactions of Reductive Activation of C-F Bonds in Ionic Liquid Media // J. Organometal. Chem. – 2021. T. 950. – С. 121995.

4. Chan K.L.A.; Shalygin A.S.; Martyanov O.N.; Welton T.; Kazarian S.G. High Throughput Study of Ionic Liquids in Controlled Environments with FTIR Spectroscopic Imaging // *J. Mol. Liq.* – 2021. T. 337. – C. 116412.
5. Ivanov M.Y.; Prikhod'ko S.A.; Bakulina O.D.; Kiryutin A.S.; Adonin N.Y.; Fedin M.V. Validation of Structural Grounds for Anomalous Molecular Mobility in Ionic Liquid Glasses. In *Molecules*, 2021; Vol. 26.
6. Sheshkovas A.Z.; Veselovskaya J.V.; Rogov V.A.; Kozlov D.V. Thermochemical Study of CO<sub>2</sub> Capture by Mesoporous Silica Gel Loaded with the Amino Acid Ionic Liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium Glycinate // *Microporous Mesoporous Mater.* – 2022. T. 341. – C. 112113.
7. Kovalev E.P.; Shalygin A.S.; Shubin A.A.; Kozhevnikov I.V.; Prikhod'ko S.A.; Adonin N.Y.; Kazarian S.G.; Martyanov O.N. Interactions of C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> with the Homologous Series [C<sub>n</sub>MIM][BF<sub>4</sub>] Ionic Liquids at High Pressure Studied by in situ ATR-FTIR Spectroscopy // *J. Mol. Liq.* – 2022. T. 348. – C. 118082.
8. Yu. Ivanov M.; Bakulina O.D.; Polienko Y.F.; Kirilyuk I.A.; Prikhod'ko S.A.; Yu. Adonin N.; Fedin M.V. Radical Ionic Liquid: An Efficient Self-Probe to Study Heterogeneous Structure in Glassy State Using EPR Spectroscopy // *J. Mol. Liq.* – 2023. T. 381. – C. 121830.
9. Khudozhitkov A.E.; Stange P.; Stepanov A.G.; Kolokolov D.I.; Ludwig R. Structure, Hydrogen Bond Dynamics and Phase Transition in a Model Ionic Liquid Electrolyte // *Phys Chem Chem Phys* – 2022. T. 24. – C. 6064-6071.
10. Strate A.; Neumann J.; Niemann T.; Stange P.; Khudozhitkov A.E.; Stepanov A.G.; Paschek D.; Kolokolov D.I.; Ludwig R. Counting Cations Involved in Cationic Clusters of Hydroxy-Functionalized Ionic Liquids by Means of Infrared and Solid-State NMR Spectroscopy // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2020. T. 22. – C. 6861-6867.
11. Khudozhitkov A.E.; Niemann T.; Stange P.; Donoshita M.; Stepanov A.G.; Kitagawa H.; Kolokolov D.I.; Ludwig R. Freezing the Motion in Hydroxy-Functionalized Ionic Liquids–Temperature Dependent NMR Deuteron Quadrupole Coupling Constants for Two Types of Hydrogen Bonds Far below the Glass Transition // *J. Phys. Chem. Lett.* – 2020. T. 11. – C. 6000-6006.
12. Khudozhitkov A.E.; Overbeck V.; Stange P.; Strate A.; Zaitsau D.; Appelhagen A.; Michalik D.; Stepanov A.G.; Kolokolov D.I.; Paschek D.; Ludwig R. Simultaneous Determination of Deuteron Quadrupole Coupling Constants and Rotational Correlation Times: the Model Case of Hydrogen Bonded Ionic Liquids // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2019. T. 21. – C. 25597-25605.
13. Khudozhitkov A.E.; Neumann J.; Niemann T.; Zaitsau D.; Stange P.; Paschek D.; Stepanov

A.G.; Kolokolov D.I.; Ludwig R. Hydrogen Bonding Between Ions of Like Charge in Ionic Liquids Characterized by NMR Deuteron Quadrupole Coupling Constants-Comparison with Salt Bridges and Molecular Systems // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2019, T. 58. – С. 17863-17871.

14. Khudozhitkov A.E.; Stange P.; Bansa A.M.; Overbeck V.; Appelhagen A.; Stepanov A.G.; Kolokolov D.I.; Paschek D.; Ludwig R. Dynamical Heterogeneities in Ionic Liquids as Revealed from Deuteron NMR // *Chemical Communications* – 2018, T. 54. – С. 3098-3101.

15. Khudozhitkov A.E.; Stange P.; Golub B.; Paschek D.; Stepanov A.G.; Kolokolov D.I.; Ludwig R. Characterization of Doubly Ionic Hydrogen Bonds in Protic Ionic Liquids by NMR Deuteron Quadrupole Coupling Constants: Differences to H-bonds in Amides, Peptides, and Proteins // *Angewandte Chemie-International Edition* – 2017, T. 56. – С. 14310-14314.

Верно:

Директор  
ИК СО РАН

Академик РАН

«21» апреля 2023 г.



/В.И. Бухтияров

(М.П.)

Ученый секретарь ИК СО РАН

кандидат химических наук

М.О. Казаков