

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»**

ПРОТОКОЛ

заседания диссертационного совета 24.1.225.01

03.10.2024

№ 31

г. Казань

Председатель совета
академик

О.Г. Синяшин

Ученый секретарь
к.х.н.

А.В. Торопчина

Присутствовали: 18 членов совета из 24 списочного состава.

Повестка дня:

1. Принятие к защите диссертации **Кондрашовой Светланы Андреевны** «DFT-расчеты химических сдвигов ЯМР атомов ^{13}C и ^{31}P , непосредственно связанных с Ni: структура и динамика комплексов никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов», представляемой на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Научный руководитель: доктор химических наук Латыпов Шамиль Камильевич.

СЛУШАЛИ: доктора химических наук Балакину М.Ю. (председателя экспертной комиссии, проводившей предварительное рассмотрение диссертации) с Заключением комиссии по диссертации **Кондрашовой Светланы Андреевны** «DFT-расчеты химических сдвигов ЯМР атомов ^{13}C и ^{31}P , непосредственно связанных с Ni: структура и динамика комплексов никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов», представляемой на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Выводы комиссии:

1. **Тема и содержание диссертации соответствуют** профилю диссертационного совета и специальности 1.4.4. Физическая химия, отрасли науки – Химические науки и удовлетворяют следующим пунктам паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия: п. 1 «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик»; п. 5 «Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях»; п. 10 «Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе

представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойство»; п. 11 «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении».

2. **Основные положения диссертации достаточно полно отражены в опубликованных работах.** Материал диссертации изложен в 4 статьях, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России и входящих в международные базы научного цитирования. Соискатель отметил научные работы, выполненные лично и в соавторстве.
3. Текст диссертации, представленный в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на сайте ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН.
4. Автореферат диссертации полно и правильно отражает материал диссертации.

Вопросов не последовало.

ПОСТАНОВИЛИ:

➤ Принять к защите диссертацию **Кондрашовой Светланы Андреевны** «DFT-расчеты химических сдвигов ЯМР атомов ^{13}C и ^{31}P , непосредственно связанных с Ni: структура и динамика комплексов никеля на основе 1-алкил-1,2-дифосфолов», представляемой на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия. Научный руководитель – д.х.н. Латыпов Шамиль Камильевич.

➤ Утвердить официальными оппонентами по диссертации:

1) **Халилова Леонарда Мухибовича**, доктора химических наук (специальность 02.00.03 - Органическая химия), профессора, главного научного сотрудника, заведующего лабораторией структурной химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», г. Уфа;

2) **Назмутдинова Рената Равильевича**, доктора химических наук (специальность 02.00.05 – Электрохимия), профессора, профессора кафедры «Неорганической химии имени профессора Н.С. Ахметова» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», г. Казань.

➤ Утвердить в качестве ведущей организации по диссертации Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук**, г. Москва.

- Разрешить печатание автореферата диссертации.
- Утвердить список рассылки автореферата.
- Назначить дату защиты диссертации на 4 декабря 2024 года.

Председатель совета
академик

О.Г. Синяшин

Ученый секретарь
к.х.н.

А.В. Горопчина