

СВЕДЕНИЯ ОБ ОФИЦИАЛЬНОМ ОППОНЕНТЕ

по диссертации Кондрашовой Светланы Андреевны на тему: «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», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

| Фамилия, имя, отчество | гражданство | Место основной работы (полное наименование организации, адрес), должность, телефон, адрес электронной почты | Ученая степень (с указанием шифра специальности и научных работников, по которой защищена диссертация) | Ученое звание | Основные работы, опубликованные в рецензируемых научных журналах за последние 5 лет |
|---------------------------|-------------|---|--|---------------|---|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| Халилов Леонард Мухибович | РФ | Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН) 450075 г. Уфа, пр-спект Октября, 141 | Доктор химических наук (02.00.03 - Органическая химия) | Профессор | 1. Khalilov L.M., Tulyabaev A.R., Yanybin V.M., Tuktarov A.R. ^1H and ^{13}C NMR chemical shift assignments of spiro-cycloalkylidenehomo- and methanofullerenes by the DFT-GIAO method // Magn. Reson. Chem. – 2011. – 49. – 378–384. 2. Khalilov L.M., Tulyabaev A.R., Tuktarov A.R. Homo- and methano[60]fullerenes with chiral attached moieties – ^1H and ^{13}C NMR chemical shift assignments and diastereotopicity effects // Magn. Reson. Chem. – 2011. – 49. – 768–774. 3. Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. On accuracy of the ^{13}C NMR chemical shift GIAO calculations of fullerene C60 derivatives at PBE/3z approach // Comput. Theor. Chem. – 2011. – 976. – 12–18. 4. Pankratyev E.Yu., Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. How Reliable are GIAO Calculations of ^1H and ^{13}C NMR Chemical Shifts? A Statistical Analysis and Empirical Corrections at DFT (PBE/3z) Level // J. Comput. Chem. – 2011. – 32. – 1993–1997. 5. Tulyabaev A.R., Tuktarov A.R., Khalilov L.M. Diastereotopic |

| | | | | |
|--|--|--|--|--|
| | | <p>Главный научный сотрудник, заведующий лабораторией структурной химии ИНК УФИЦ РАН</p> <p>E-mail: khalilovlm@gmail.com</p> | | <p>splitting in the ^{13}C NMR spectra of sulfur homofullerenes and methanofullerenes with chiral fragments // <i>Magn. Reson. Chem.</i> – 2014. – 52. – 3–9.</p> <p>6. Kiryanov I. I., Mukminov F. H., Tulyabaev A. R., Khalilov L. M. Prediction of ^{13}C NMR chemical shifts by artificial neural network. I. Partial charge model as atomic descriptor // <i>Chemom. Intell. Lab. Syst.</i> – 2016. – 152. – 62–68.</p> <p>7. Tulyabaev A. R., Kiryanov I. I., Samigullin I. S., Khalilov L. M. Are there reliable DFT approaches for ^{13}C NMR chemical shift predictions of fullerene C60 derivatives? // <i>Int. J. Quantum Chem.</i> – 2017. – 117. – 7–14.</p> <p>8. Kiryanov I. I., Tulyabaev A. R., Mukminov F. Kh., Khalilov L. M. Neural network for prediction of ^{13}C NMR chemical shifts of fullerene C60 mono-adducts // <i>J. Chemometrics.</i> – 2018. – 32(9). – e3037.</p> <p>9. Tulyabaev A. R., Khalilov L. M. How regioisomeric fullerene C60 bis-cycloadducts can be distinguished with ^{13}C NMR? Quantum-chemical assessment and empirical correction // <i>Comput. Theor. Chem.</i> – 2019. – 1158. – 1–7.</p> <p>10. Savchenko R. G., Mescheryakova E. S., Bikmukhametov K. Sh., Tulyabaev A. R., Parfenova L. V., Khalilov L. M. Hydroxy Derivatives of Poststerone and Its Nontrivial 13(14-->8)-Abeo-analogues: Synthesis, Crystal Packing, and Intermolecular Hydrogen Bonds // <i>J. Mol. Struct.</i> – 2021. – 1227. – 129509.</p> <p>11. Parfenova, L.V., Kovyazin, P.V., Mukhamadeeva, O.V., Ivchenko, P.V., Nifant'ev, I.E., Khalilov, L.M., Dzhemilev, U.M. Zirconocene dichlorides as catalysts in alkene carbo- And cyclometalation by AlEt3: intermediate structures and dynamics// <i>Dalton Trans.</i> – 2021. – 50(43). – 15802–15820.</p> <p>12. Mescheryakova E.S., Bikmukhametov K.S., Bayguzina A.R., Lutfullina A.R., Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. X-ray diffraction and theoretical study of molecular and crystal structure of new crystalline aryl- and alkyl-substituted N-(adamantan-1-yl)amides: similarities and differences // <i>Journal of Molecular Structure.</i></p> |
|--|--|--|--|--|

| | | | | | |
|--|--|--|--|--|--|
| | | | | | <p>2022. V. 1261. P. 132783.</p> <p>13. Khazhiev S.Y., Khusainov M.A., Kuznetsov V.V., Khalikov R.A., Kataev V.A., Tyumkina T.V., Mescheryakova E.S., Khalilov L.M. Structure and conformational analysis of 5,5-bis(bromomethyl)-2-trichloromethyl-1,3-dioxane by XRD, NMR and computer simulation // Journal of Molecular Structure. 2022. V. 1254. P. 132326.</p> <p>14. Tulyabaev A.R., Khalilov L.M. Quantum-chemical simulation of ¹³C NMR chemical shifts of fullerene C₆₀ exo-derivatives // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2023. V. 97. № 9. P. 1923-1928.</p> <p>15. Parfenova L.V., Bikmeeva A.Kh., Kovyazin P.V., Khalilov L.M. The dimerization and oligomerization of alkenes catalyzed with transition metal complexes: catalytic systems and reaction mechanisms // Molecules. 2024. V. 29. № 2. P. 502.</p> |
|--|--|--|--|--|--|

Официальный оппонент

Халилов Леонард Мухибович