

## Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Рычкова Д. А.

### «ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ КОНФОРМАЦИОННЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В МОЛЕКУЛЕ И ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ХОДЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЛИ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ (НА ПРИМЕРЕ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ МЕТАЦЕТАМОЛА, ТОЛАЗАМИДА, L-СЕРИНА И СОЛЕЙ СЕРОТОНИНА)»

на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.21 – химия твёрдого тела

Фамилия, имя, отчество	Гатилов Юрий Васильевич
Ученая степень	Доктор химических наук 02.00.04 - физическая химия 02.00.03 - органическая химия
Ученое звание (по кафедре, специальности)	-
Основное место работы	
Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук.
Наименование подразделения	Лаборатория физических методов исследования
Должность	Ведущий научный сотрудник
Почтовый индекс, адрес, веб-сайт, телефон, адрес электронной почты организации	630090 Новосибирск, просп. акад. Лаврентьева, 9, тел. (383)330-88-50, e-mail: benzol@nioch.nsc.ru, www.nioch.nsc.ru
Публикации по теме диссертации	
<p>1. Pavlova A., Mikhalchenko O., Rogachev A., Il'ina I., Korchagina D., <b>Gatilov Y.</b>, Tolstikova T., Volcho K., Salakhutdinov N. Synthesis and analgesic activity of stereoisomers of 2-(3(4)-hydroxy-4(3)-methoxyphenyl)-4,7-dimethyl-3,4,4a,5,8,8a-hexahydro-2H-chromene-4,8-diols. <i>Medicinal Chemistry Research</i>, 2015, 24 (11), p. 3821-3830.</p> <p>2. Vasilevsky S.F., Baranov D.S., Mamatyuk V.I., Fadeev D.S., <b>Gatilov Y.V.</b>, Stepanov A.A., Vasilieva N.V., Alabugin I.V. Conformational flexibility of fused tetracenedione propellers obtained from one-pot reductive dimerization of acetylenic quinines. <i>Journal of Organic Chemistry</i>, 2015, 80 (3), p. 1618-1631.</p> <p>3. Artem'ev A.V., Shagun V.A., Gusarova N.K., Liu C.W., Liao J.-H., <b>Gatilov Y.V.</b>, Trofimov B.A. DFT study and dynamic NMR evidence for cis-trans conformational isomerism in square planar Ni(II) thioselenophosphate, Ni(SeSPPH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>. <i>Journal of Organometallic Chemistry</i>, 2014, 768, p. 151-156.</p> <p>4. Bushuev M.B., Daletsky V.A., Pishchur D.P., <b>Gatilov Y.V.</b>, Korolkov I.V., Nikolaenkova E.B., Krivopalov V.P. Unprecedented bistability domain and interplay between spin crossover and polymorphism in a mononuclear iron(ii) complex. <i>Dalton Transactions</i>, 2014, 43 (10), p. 3906-3910.</p> <p>5. Rybalova T.V., <b>Gatilov Y.V.</b>, Karpov V.M. Supramolecular architecture of crystals of 2-amino-1,1,4,5,6,7-hexafluoroindene-3-carbonitrile and its complex and polymorphic modifications of the complex of 2-amino-1,1,4,5,6,7-hexafluoro-3-trifluoroacetylidene with dioxane. <i>Journal of Structural Chemistry</i>, 2014, 55 (8), p. 1496-1505.</p>	

## Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Рычкова Д. А.

### «ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ КОНФОРМАЦИОННЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В МОЛЕКУЛЕ И ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ХОДЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЛИ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ (НА ПРИМЕРЕ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ МЕТАЦЕТАМОЛА, ТОЛАЗАМИДА, L-СЕРИНА И СОЛЕЙ СЕРОТОНИНА)»

на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.21 – химия твёрдого тела

Фамилия, имя, отчество	Рыкунов Алексей Александрович
Ученая степень	Кандидат химических наук 02.00.04 – физическая химия
Ученое звание (по кафедре, специальности)	-
Основное место работы	
Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина
Наименование подразделения	-
Должность	старший научный сотрудник
Почтовый индекс, адрес, веб-сайт, телефон, адрес электронной почты организации	456770, Снежинск, Челябинская область, ул. Васильева, 13, а/я 245. Тел. (351-46) 5-51-20, 5-43-67 E-mail: vniitf@vniitf.ru, <a href="http://www.vniitf.ru">http://www.vniitf.ru</a>
Публикации по теме диссертации	
<ol style="list-style-type: none"><li>1. <b>Rykounov A.A.</b> Investigation of the pressure dependent thermodynamic and elastic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using dispersion corrected density functional theory. Journal of Applied Physics, 2015, 117 (21), art. no. 215901.</li><li>2. Vener M.V., Levina E.O., Koloskov O.A., <b>Rykounov A.A.</b>, Voronin A.P., Tsirelson V.G. Evaluation of the lattice energy of the two-component molecular crystals using solid-state density functional theory. Crystal Growth and Design, 2014, 14 (10), p. 4997-5003.</li><li>3. Maiorov V.D., Kislina I.S., <b>Rykounov A.A.</b>, Vener M.V. The structure and vibrational features of proton disolvates in water-ethanol solutions of HCl: The combined spectroscopic and theoretical study. Journal of Physical Organic Chemistry, 2014, 27 (2), p. 135-141.</li><li>4. Vener M.V., Shishkina A.V., <b>Rykounov A.A.</b>, Tsirelson V.G. Cl...Cl interactions in molecular crystals: Insights from the theoretical charge density analysis. Journal of Physical Chemistry A, 2013, 117 (35), p. 8459-8467.</li><li>5. <b>Rykounov A.A.</b>, Stash A.I., Zhurov V.V., Zhurova E.A., Pinkerton A.A., Tsirelson V.G. On the transferability of QTAIM descriptors derived from X-ray diffraction data and DFT calculations: Substituted hydroxypyrimidine derivatives. Acta Crystallographica, Section B: Structural Science, 2011, 67 (5), p. 425-436.</li></ol>	

## Сведения о ведущей организации

по диссертации Рычкова Д. А.

### «ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ КОНФОРМАЦИОННЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В МОЛЕКУЛЕ И ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ХОДЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЛИ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ (НА ПРИМЕРЕ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ МЕТАЦЕТАМОЛА, ТОЛАЗАМИДА, L-СЕРИНА И СОЛЕЙ СЕРОТОНИНА)»

на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.21 – химия твёрдого тела

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук

Адрес: Институтская, 3, Новосибирск, 630090, Россия,  
тел. +7(383) 330-91-50, факс +7(383) 330-73-50,  
e-mail: admin(at)kinetics.nsc.ru, <http://www.kinetics.nsc.ru>

Публикации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Bashirov D.A., et al. Novel applications of functionalized 2,1,3-benzothiadiazoles for coordination chemistry and crystal engineering // RSC Adv. 2014. Vol. 4, № 54. P. 28309.
2. Kiselev V.G., Cheblakov P.B., Gritsan N.P. Tautomerism and thermal decomposition of tetrazole: high-level ab initio study // J. Phys. Chem. A. 2011. Vol. 115, № 9. P. 1743–1753.
3. Kubicki J., et al. Photochemistry of 2-naphthoyl azide. An ultrafast time-resolved UV-vis and IR spectroscopic and computational study // J. Am. Chem. Soc. 2011. Vol. 133, № 25. P. 9751–9761.
4. Veber S.L., et al. FTIR study of thermally induced magnetostructural transitions in breathing crystals // Inorg. Chem. 2015. Vol. 54, № 7. P. 3446–3455.
5. Basova T.V., et al. Optical spectroscopy and XRD study of molecular orientation, polymorphism, and phase transitions in fluorinated vanadyl phthalocyanine thin films // J. Phys. Chem. C. 2013. Vol. 117, № 14. P. 7097–7106.