

Сведения о ведущей организации

по диссертации Береговой Ирины Владимировны

на тему «Адиабатические поверхности потенциальной энергии – основа квантовохимической интерпретации структурных особенностей и реакционной способности органических ион-радикалов и их ассоциатов с нейтральными молекулами»

на соискание ученой степени доктора химических 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 образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	ФГБОУ ВО «ИГУ», ИГУ
Ведомственная принадлежность	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Тип организации	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
Наименование подразделения	- Лаборатория квантовой химии - Химический факультет, кафедра физической и коллоидной химии
Почтовый адрес организации	664003, Россия, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1
Веб-сайт	https://www.isu.ru
Телефон	+7 (395) 252-19-00
Адрес электронной почты	rector@isu.ru
Список основных публикаций работников структурного подразделения, в котором будет готовиться отзыв, по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	1. Vitkovskaya N.M. , Bobkov A.S., Kuznetsova S.V., Shcherbakova V.S., Ivanov A.V. / Base-promoted formation of an annelated pyrrolo-1,4-oxazine ensemble from 1 <i>H</i> -pyrrol-2-ylmethanol and propargyl chloride: a theoretical and experimental study // ChemPlusChem - 2020. - V. 85, N. 1 - P. 88-100 2. Vitkovskaya N.M. , Orel V.B., Kobychev V.B. , Bobkov A.S., Absalyamov D.Z., Trofimov B.A. / Quantum-chemical models of KOH(KOBU ⁺)/DMSO superbasic systems and mechanisms of base-promoted acetylene reactions // Int. J. Quantum Chem. – 2020 – V.120, N. 9 – P. e26152 (1-12)

3. Bobkov A.S., **Vitkovskaya N.M.**, Trofimov B.A. / Cascade Assembly of 4,5,6,7-Tetrahydroindole from Cyclohexanone Oxime and Acetylene in the KOH/DMSO Superbase Medium: A Quantum Chemical Study // J. Org. Chem. – 2020 – V.85, N.10 – P. 6463–6470
4. **Vitkovskaya N.M.**, Orel V.B., Absalyamov D.Z., Trofimov B.A. / Self-Assembly of *N*-Phenyl-2,5-dimethylpyrrole from Acetylene and Aniline in KOH/DMSO and KOBu^t/DMSO Superbase Systems: A Quantum-Chemical Insight // J. Org. Chem. – 2020 – V.85, N.16 – P. 10617–10627
5. Ivanov A.V., Martynovskaya S.V., Shcherbakova V.S., Ushakov I.A., Borodina T.N., Bobkov A.S., **Vitkovskaya N.M.** / Ambient access to a new family of pyrrole-fused pyrazine nitrones via 2-carbonyl-*N*-allenylpyrroles // Org. Chem. Front. – 2020 – V. 7, N. 24 - P. 4019-4025
6. **Kobychev V.B.**, Pradedova A.G., Trofimov B.A. / A one-pot assembly of Δ^2 -isoxazolines from ketones, aryl acetylenes and hydroxylamine: Revisiting the mechanism in terms of quantum chemistry // J. Mol. Struct. - 2021 - V.1246, P.131185(1-11)
7. Orel V.B., **Vitkovskaya N.M.**, Bobkov A.S., Semenova N.V., Schmidt E.Y., Trofimov B.A. / Aldol Condensation Versus Superbase-Catalyzed Addition of Ketones to Acetylenes: A Quantum-Chemical and Experimental Study // J. Org. Chem. - 2021 - V.86, N. 11, P.7439-7449
8. Bidusenko I.A., Schmidt E.Yu., Ushakov I.A., Vashchenko A.V., Protsuk N.I., Orel V.B., **Vitkovskaya N.M.**, and Trofimov B.A. / Semistabilized Diazatrienyl Anions from Pyridine Imines and Acetylenes: An Access to (*Z*)-Stilbene/Imidazopyridine Ensembles, Benzyl Imidazopyridines, and Beyond // J. Org. Chem - 2022 - V.87, N.18, P. 12225-12239
9. Absalyamov D.Z., **Vitkovskaya N.M.**, Orel V.B., Schmidt E.Yu., Trofimov B.A. / Quantum-Chemical Insight into Self-Organization of Complex Molecules from Acetylene and Anilines Catalyzed by Superbase KOH/DMSO: One-Pot Cascade Assembly

of

1,3-Bis(arylamines) // Asian J. Org. Chem. - 2023 - V.12, N.4, P.e202300042

10. Teplyashin N.V., Bobkov A.S., Korchevin N.A., Rozentsveig I.B., **Vitkovskaya N.M.** / Reactivity of bis(2-chloroprop-2-enyl)sulfide in the system hydrazine hydrate/alkali: A quantum chemical insight // J. Phys. Org. Chem. – 2023 - V.36, N.9, P. e4515

11. Orel V.B., Zubarev A.A., Bidusenko I.A., Ushakov I.A., **Vitkovskaya N.M.** / Quantum-Chemical Study of the Assembly Mechanism of 1-Pyrrolines from N-Benzylaldimines and Arylacetylenes in KO^tBu/DMSO Superbasic Medium // J. Org. Chem - 2023 - V.88, N.11, P.7058-7069

12. Ivanov A.V., Bobkov A.S., Martynovskaya S.V., Budaev A.B., **Vitkovskaya N.M.** / A Short-Cut to Substituted Fused Pyrrolo[2,1-c][1,4]oxazines: A Hybrid Theoretical and Experimental Study // Asian J. Org. Chem. - 2023 - V.12, N.8, P.e202300153


13. Прадедова А.Г., **Кобычев В.Б.** / Квантовохимическое исследование механизма стереоселективного образования (*E,Z*)-1,3-дифенил-2-аза-1,3-диена из *N*-бензил-1-фенилэтан-1-имина и ацетилена в суперосновной среде KO^tBu/ДМСО // ЖСХ - 2023 - Т.64, N. 3, С. 107402

14. **Витковская Н.М.**, Орел В.Б., **Кобычев В.Б.**, Бобков А.С. / Квантовохимические исследования механизмов сборок карбо- и гетероциклов на основе реакций ацетиленов в суперосновных средах // ЖОрХ – 2023 – Т. 59, N. 10, С. 1301-1318

15. **Kobychев V.B.**, Absalyamov D.Z., Oparina L.A., Trofimov B.A. / A Quantum Chemical Study on the Mechanisms of Acylpyrrolylacetylenes Reactions With 1-Pyrrolines // ChemistrySelect – 2024 – V.9, N.4, P. e202304402

Проректор по научной работе
и международной деятельности
д-р соц. наук, доц.




К.В. Григоричев