

СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по диссертации Корабельникова Дмитрия Васильевича
на тему «Исследование структуры, межатомных взаимодействий
и физико-химических свойств оксианионных кристаллов
методом компьютерного моделирования»
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Полное наименование организации в соответствии с Уставом	Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»
Сокращенное наименование организации в соответствии с Уставом	ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)", Южно-Уральский государственный университет
Почтовый адрес организации	454080, г. Челябинск, пр. Ленина, д. 76
Телефон	+7 (351) 263-58-82
Адрес электронной почты	admin@susu.ru
Адрес официального сайта	www.susu.ru
Список основных публикаций сотрудников организации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15):	
1. Matveychuk, Y.V. Negative Linear Compressibility of Formate Crystals from the Viewpoint of Quantum Electronic Pressure / Y.V. Matveychuk, S.A. Sobalev, P.I. Borisova, E.V. Bartashevich, V.G. Tsirelson // Crystals. – 2023. – V. 13, № 7. –p. 1147.	
2. G. Makarov, O. Borodina, T. Makarova, E. Bartashevich, S. Sapozhnikov. Molecular Dynamics Study of Cured ED-20 Epoxy Resin for Predicting the Glass Transition Temperature and Relationship with Structure Features // Journal of Physical Chemistry A. - 2023. - V. 127. – P. 3894–3905.	
3. E.V. Bartashevich, S.E. Mukhitdinova, I.V. Klyuev, V.G. Tsirelson. Parametric Evaluation of the Energy of Tetrel Bonds in Complexes of Tetrahedral Molecules with Ammonia and Halide Anions // Russian Journal of Physical Chemistry A. - 2023. - V. 97. – P. 2449–2456.	
4. E.V. Bartashevich, E.O. Levina, I.D. Yushina, S.A. Sozykin, V.G. Tsirelson. Electron delocalization in defect-containing graphene and its influence on tetrel bond formation // Physical Chemistry Chemical Physics. - 2023. - V. 25. – P. 24342–24354.	
5. G.I. Makarov, R.V. Reshetnikova, E.V. Bartashevich. Modeling the Compressibility of a Multicomponent Liquid-Crystalline Phase CHS1 by Means of Molecular Dynamics // Russian Journal of Physical Chemistry A. - 2022. - V. 96. –	

P. 1513–1518.

6. A.E. Masunov, M. Wiratmo, A.A. Dyakov, Y.V. Matveychuk, E.V. Bartashevich. Prediction of Crystal Structures and Mechanical Properties for Brittle, Plastic, and Elastic Polymorphs of 4-Bromophenyl 4-Bromobenzoate // *Crystal Growth and Design*. - 2022. - V. 22. – P. 4546–4558.

7. O. Borodina, I. Ovchinnikova, O. Fedorova, G. Makarov, E. Bartashevich. Effect of 4-Hydroxy-L-proline-containing podands on the stereoselectivity of Biginelli reaction according to molecular dynamics // *Computational and Theoretical Chemistry*. - 2022. - V. 1217. – P. 113885.

8. E.V. Bartashevich, S.E. Mukhitdinova, I.V. Klyuev, V.G. Tsirelson. Can We Merge the Weak and Strong Tetrel Bonds? Electronic Features of Tetrahedral Molecules Interacted with Halide Anions // *Molecules*. - 2022. - V. 27. – P. 5411.

9. E.V. Bartashevich, S.A. Sobalev, Yu.V. Matveychuk, V.G. Tsirelson. Simulation of the compressibility of isostructural halogen containing crystals on macro- and microlevels // *J. Struct. Chem.* - 2021. - V. 62. – P.1607.

10. Yu.V. Matveychuk, E.V. Bartashevich, K.K. Skalyova, V.G. Tsirelson. Quantum electronic pressure and crystal compressibility for magnesium diboride under simulated compression // *Mater. Today Commun.* - 2021. - V. 26. – P.101952.

11. Sakthidharan C.P., Zhrebtsov D.A., Podgornov F.V., Matveychuk Y.V., Bartashevich E.V., Nayfert S.A., Adonin S.A., Gavriyak M.V., Boronin V.A., Polozov M.A., Rajakumar K., Niewa R., Karthikeyan S., Sarojadevi M., Prabunathan P. Crystal structures and dielectric properties of 4,4'-dimethyl-6,6'-dichlorothioindigo (Pigment Red 181) // *Acta Cryst. B*. - 2021. - V. 77. – P.23-30.

12. Bol'shakov O.I., Yushina I.D., Stash A.I., Bartashevich E.V., Rakitin O.A., Aysin R.R. Structure and properties of 4-phenyl-5H-1,2,3-dithiazole-5-thione polyiodide with S–I–S bridged complex // *Mater. Today Commun.* - 2020. - V. 31. – P.1729.

13. Юшина И.Д., Барташевич Е.В. Кристаллы иодониевых полииодидов в рамках периодических расчетов с локализованными атомными базисными наборами // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия»*. - 2020. - Т. 12. №4 – С. 101.

14. E.V. Bartashevich, S.A. Sobalev, Yu.V. Matveychuk, V.G. Tsirelson. Variations of quantum electronic pressure under the external compression in crystals with halogen bonds assembled in Cl₃-, Br₃-, I₃-synthons // *Acta Cryst. B*. - 2020. - V. 76. – P.514.

15. Yushina I.D., Podgornov F.V., Gavriyak M., Boronin V., Bartashevich E.V. Temperature dependences of electric properties of tetramethylammonium mono- and pentaiodide // *Journal of Advanced Dielectrics*. - 2019. - V. 9. – P. 1950052.

16. Yushina I.D., Rudakov B.V., Stash A.I., Bartashevich E.V. Comparison of

non-covalent interactions and spectral properties in 1-methyl-3-methylthio-5-phenyl-1,2,4-triazinium monoand tetraiodide crystals // Structural Chemistry. - 2019. - V. 30. – P. 1981.

17. Bartashevich E., Matveychuk Y., Tsirelson V. Identification of the Tetrel Bonds between Halide Anions and Carbon Atom of Methyl Groups Using Electronic Criterion // Molecules. - 2019. - V. 24. – P. 1083.

18. Zharebtsov D.A., Nayfert S.A., Polozov M.A., Zhivulin D.E., Zhivulin V.E., Stash A.I., Merzlov S.V., Bartashevich E.V., Avdin V.V., Sakthidharan C.P., Chen Y.S., Hsu H.S., Guo F.W. The Structure and Properties of 2,3-7,8-Dibenzpyrene-1,6-Quinone // Crystallography Reports. - 2018. - V. 63. – P. 1110.

19. Матвеева К.В., Жеребцов Д.А., Барташевич Е.В. Моделирование нековалентных взаимодействий кубовых красителей с фрагментами нитрида углерода // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». - 2018. - Т. 10. №1 – С. 37.

20. Masunov A.E., Torres K., Dyakov A.A., Yushina I.D., Bartashevich E.V. First-Principles Crystal Engineering of Nonlinear Optical Materials. II. Effect of Halogen Bonds on the Structure and Properties of Triiodobenzenes // Journal of Physical Chemistry C. - 2018. - V. 122. – P. 22622-22631.

21. Yu.V. Matveychuk, E.V. Bartashevich, V.G. Tsirelson. How the H-Bond Layout Determines Mechanical Properties of Crystalline Amino Acid Hydrogen Maleates // Cryst. Growth Des. - 2018. - V. 18. – P.3366-3375.

доктор технических наук, доцент,
первый проректор – проректор
по научной работе
ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)»



А.В. Коржов