

Сведения о ведущей организации

по диссертационной работе Макаровой Марии Валентиновны
«Квантовохимическое исследование физико-химических аспектов таутомерии
гидрокси- и карбонилсодержащих соединений», представленной на соискание ученой
степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

Адрес: 190013, Санкт-Петербург, Московский пр., 26.

Список основных публикаций в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет
(2010-2014 гг.)

1. Н. С. Панина, П. Б. Давидович, А. Н. Беляев Квантовохимическое DFT исследование кислотных свойств тиолов HSR и лигандных способностей их анионов SR⁻. Журнал Общей химии, 2010. Т. 80. № 9. С. 1481-1486.
2. Н. С. Панина, А. Н. Беляев, А. В. Еремин, П. Б. Давидович. Квантово-химическое DFT исследование продуктов гидролиза аквокомплексов Fe(II) и Fe(III). Журнал Общей химии, 2010. Т. 80. № 5. С.719-724.
3. М. В. Карпов, Н. С. Панина, А. В. Ерёмин, М. Д. Стадничук. Взаимодействие алифатических иминов триметилсиллилпропиналя с 8-меркаптоаденином. Журнал Общей химии, 2010. Т. 80. № 6. С. 1025-1027.
4. A. A. Malygin, S. D. Dubrovenskii. Quantum-chemical approaches to identification of nanostructures synthesized by molecular layering technique. Russian Journal of General Chemistry, 2010. V. 80. P. 643-657.
5. A. N. Gukova, S. D. Dubrovenskii, A. A. Malygin. Quantum-chemical analysis and experimental study of the process of the silica surface interaction with the CrO₂Cl₂ and VOCl₃ vapor mixture. Russian Journal of General Chemistry, 2010. V. 80. P. 1168-1175.
6. Н. С. Панина, А. Н. Беляев, А. В. Еремин, М. А. Степанова, А. И. Панин Квантово-химическое моделирование реакций нуклеофильного замещения в комплексах *cis*-Pt(NH₃)₂Cl₂ и *cis*-Pd(NH₃)₂Cl₂, Известия Академии наук. Серия химическая, 2012, № 4, с.794-798.
7. Н. С. Панина, А. Н. Беляев, А. В. Еремин, Л. С. Герасимова. Квантово-химическое DFT исследование двух типов устойчивых структур высокоспиновых биядерных карбоксилатных комплексов Ni(II). Журнал Общей химии, 2012. Т. 82. № 9. С. 1476-1480.
8. Афонин М.В., Симанова С.А., Бурмистрова Н.М., Панина Н.С., Дальнова О.А. Извлечение хлорокомплексов палладия(II) и родия(III) комплексообразующим S,N-содержащим сорбентом. Журнал прикладной химии, 2012, т.85, № 5, с.689-695.
9. В. С. Фундаменский, С. М. Рамш, В. А. Брусков, А. В. Смирнова, А. Ю. Яничев, М. Б. Флейшер, С. В. Беляков. Изучение таутомерии (карбамимидоилсульфанил)-уксусной («псевдотиогидантоиновой») кислоты методами РСА и РМ6. Журнал органической химии, 2013. V. 49. P. 690-696.
10. P. B. Davidovich, V. V. Gurzhy, A. N. Belyaev. Synthesis and structure of novel dinitrosyl iron complexes [Fe₂(μ-SCH₂CH₂NHR)₂(NO)₄]. Russian Journal of General Chemistry, 2014. V. 84. P. 719-721.