

Сведения о ведущей организации

по диссертации Тепляшина Никиты Владимировича «Квантовохимическое исследование механизмов сборки *S*-гетероциклов из 2-хлорпропен-2-илсульфидов в системе $\text{KOH}/\text{N}_2\text{H}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ », представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия

Полное наименование организации	Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»
Сокращенное наименование организации	ННГУ им. Н.И. Лобачевского
Место нахождения (страна, город)	Российская Федерация, г. Нижний Новгород
Почтовый адрес	603022, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
Телефон, адрес электронной почты, сайт (при наличии)	+7 (831) 462-30-03 unn@unn.ru http://www.unn.ru/
Список публикаций работников ведущей организации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	1. Ignatov, S. K. Isomer Lifetimes and Structure Dynamics of Sub-Nanosized Magnesium Clusters / S. K. Ignatov, S. V. Panteleev, A. E. Masunov // The Journal of Physical Chemistry A: Dynamics, Kinetics, Environmental Chemistry, Spectroscopy, Structure, Theory. — 2026. — V. 130, N. 11. — P. 2287-2309. 2. Parametrization of Gaussian approximation potential for the global optimization of magnesium clusters Mg_N ($N \leq 100$) / I. S. Steshin, S. V. Panteleev, I. V. Petukhov, S. K. Ignatov // PCCP: Physical Chemistry Chemical Physics. — 2025. — V. 27, N. 36. — P. 18960-18977. 3. Temperature-Induced Restructuring of Mycolic Acid Bilayers Modeling the Mycobacterium tuberculosis Outer Membrane: A Molecular Dynamics Study / A. V. Vasyankin, S. V. Panteleev, I. S. Steshin, E. A. Shirokova, A. V. Rozhkov, G. D. Livshits, E. V. Radchenko, S. K. Ignatov, V. A. Palyulin // Molecules. — 2024. — V. 29, N. 3. — Art. 696. 4. Free Energy Barriers for Passive Drug Transport through the Mycobacterium tuberculosis Outer Membrane: A Molecular Dynamics Study / I. S. Steshin, A. V. Vasyankin, E. A. Shirokova, A. V.

	Rozhkov, G. D. Livshits, S. V. Panteleev, E. V. Radchenko, S. K. Ignatov, V. A. Palyulin // International Journal of Molecular Sciences. — 2024. — V. 25, N. 2. — Art. 1006. 5. Широкова, Е. А. Ориентационная изомерия в кластерах воды $(\text{H}_2\text{O})_n = 2-5$, соответствующих полному набору ориентированных графов / Е. А. Широкова, С. К. Игнатов // Химическая физика. — 2024. — Т. 43, № 10. — С. 21-35. 6. Ignatov, S. K. Structure and properties of subnanosized magnesium clusters at correlated <i>ab initio</i> levels / S. K. Ignatov, S. V. Panteleev, A. E. Masunov // Molecular Physics. — 2024. — Art. e2424424. 7. Tris(trifluoromethyl)germyl biphenyl conjugated molecular system with ferrocenyl substituent: Confirmation of photoinduced intramolecular charge transfer to the germanium center / N. L. Ermolaev, G. K. Fukin, A. S. Shavyrin, M. A. Lopatin, O. V. Kuznetsova, D. I. Kryzhkov, S. K. Ignatov, E. P. Chuhmanov, N. T. Berbenova, K. P. Pashchenko // Journal of Organometallic Chemistry. — 2023. — V. 983. — Art. 122535. 8. Effect of Orientational Isomerism in Neutral Water Hexamers on Their Thermodynamic Properties and Concentrations in the Gas Phase / E. A. Shirokova, A. G. Razuvaev, A. V. Mayorov, B. Aradi, T. Frauenheim, S. K. Ignatov // Journal of Cluster Science. — 2023. — V. 34, N. 4. — P. 2029-2046. 9. Rozhkov, A. V. Resonant increase of ionic conductance of yttria-stabilized zirconia in an alternating external electric field / A. V. Rozhkov, S. K. Ignatov, E. V. Suleimanov // Journal of Solid State Electrochemistry. — 2023. — V. 27, N. 5. — P. 1177-1184. 10. Machine Learning Prediction of Mycobacterial Cell Wall Permeability of Drugs and Drug-like Compounds / E. V. Radchenko, G. V. Antonyan, S. K. Ignatov, V. A. Palyulin // Molecules. — 2023. — V. 28, N. 2. — Art. 633. 11. Conformational Dynamics and Stability of Bilayers Formed by Mycolic Acids from the Mycobacterium tuberculosis Outer Membrane / L. A. Savintseva, I. S. Steshin, A. A. Avdoshin, S. V. Panteleev, A. V. Rozhkov, E. A. Shirokova, G. D. Livshits, A. V. Vasyankin, E. V. Radchenko, S. K. Ignatov, V. A.
--	---

	Palyulin // Molecules. — 2023. — V. 28, N. 3. — Art. 1347. 12. Theoretical Study of Charge Mobility in Crystal Porphine and a Computer Design of a Porphine-Based Semiconductive Discotic Liquid Mesophase / L. Savintseva, A. Avdoshin, S. Ignatov, A. Novikov // International Journal of Molecular Sciences. — 2023. — V. 24, N. 1. — P. 736. 13. Ignatov, S. K. Unexpected polarization properties of sub-nanosized magnesium clusters / S. K. Ignatov, A. E. Masunov // RSC Advances. — 2023. — V. 13, N. 6. — P. 4065-4076. 14. Atomistic simulations of chitosan as a possible carrier system for miRNA transport / A. Avdoshin, V. Naumov, L. C. Ciacchi, S. K. Ignatov, S. Köppen // Materials Advances. — 2023. — Vol. 4, No. 4. — P. 1113-1124. 15. Development of novel porphyrin/combretastatin A-4 conjugates for bimodal chemo and photodynamic therapy: Synthesis, photophysical and TDDFT computational studies / N. S. Kuzmina, V. F. Otvagin, A. A. Maleev, M. A. Urzaeva, A. V. Nyuchev, S. K. Ignatov, A. E. Gavryushin, A. Yu. Fedorov // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. — 2022. — Vol. 433. — Art. 114138.
--	--

Ведущая организация подтверждает, что соискатель не является ее сотрудником и не имеет научных работ по теме диссертации, подготовленных на базе ведущей организации или в соавторстве с ее сотрудниками.

Проректор по науке и инновациям Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Г.И. Лобачевского",

к.ф.-м.н.



М.Ю. Грязнов

16 сентября 2026 г.