

СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по диссертации Шадринной Гузель Руслановны, выполненной на тему «Анализ связи «структура – температура стеклования органических гомополимеров» в рамках теории химического строения органических соединений и теорий стеклования полимеров» на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.4.3. Органическая химия

Полное и сокращенное наименование организации	Почтовый адрес, телефон, адрес эл. почты, адрес официального сайта в сети «Интернет»	Сведения о лице, утвердившем отзыв			Основные работы работников ведущей организации по теме диссертации, опубликованные в рецензируемых научных журналах за последние 5 лет
		Фамилия, имя, отчество	Ученая степень	Должность	
Полное: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» Сокращенные: ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», ФГАОУ ВО КФУ, КФУ, Казанский федеральный университет, Казанский университет, Казанский (Приволжский) федеральный университет	420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18 +7 (843) 233-71-09 public.mail@kpfu.ru https://kpfu.ru	Таюрский Дмитрий Альбертович	Д.ф.-м.н.	Первый проректор – проректор по научной деятельности	1. Bogdanov, I.M. Polyimidazolium amphiphilic dendrimers on thiacalix[4]arene and gallic acid platforms via copper-free click chemistry: synthesis, self-assembly and DNA binding / I.M. Bogdanov, A.A. Fedoseeva, A.A. Glukhova, E.D. Sultanova, T.A. Mukhametzyanov, V.G. Evtugyn, S.E. Solovieva, V.A. Burilov, I.S. Antipin // Polymer Chemistry. – 2026. – V. 17, №1. – P. 54-67. https://doi.org/10.1039/d5py00984g 2. Ocherednyuk, E.A. Amphiphilic CuAAC dendrimers based on a Calix[4]arene core with a polyamine periphery: synthesis, aggregation and CT DNA complexation / E.A. Ocherednyuk, E.D. Sultanova, A.M. Gazalieva, P.A. Artemieva, E.O. Chibirev, T.A. Mukhametzyanov, S.E. Solovieva, V.A. Burilov, I.S. Antipin // New Journal of Chemistry. – 2025. – V. 49, №45. – P. 19799-19813. https://doi.org/10.1039/d5nj03075g 3. Kashafutdinova, I.M. Active learning approaches in molecule pKi prediction / I.M. Kashafutdinova, A. Poyezzhayeva, T. Gimadiev, T. Madzhidov // Molecular Informatics. – 2025. – V. 44, №1. – Article e202400154. https://doi.org/10.1002/minf.202400154 4. Byadi, S. DOTools: a Python platform for descriptor calculation and model optimization / S. Byadi, Ph. Gantzer, T. Gimadiev, P. Sidorov // Digital Discovery. – 2025. – V. 4, №5. – P. 1188-1198. https://doi.org/10.1039/d4dd00399c 5. Ovsyannikov, A.S. Synthesis and porous crystal structure of 1D zigzag π -stacked supramolecular polymer based on a new binuclear Ag ^I thiacalix[4]arene complex bearing two 2,2'-bipyridyl moieties / A.S. Ovsyannikov,
		Сведения о лице, подготовившем отзыв			
		Антипин Игорь Сергеевич	Д.х.н., чл.-корр. РАН	Профессор кафедры органической и медицинской химии	

I.A. Litvinov, D.E. Pavlyuk, V.A. Platonov, I.S. Kovalev, D.S. Kopchuk, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // Russian Chemical Bulletin. – 2025. – V. 74, №2. – P. 418-427. <https://doi.org/10.1007/s11172-025-4533-6>

6. Furer, V.L. A computational and spectral analysis of 2-arylhydrazone thiazolo[3,2-*a*]pyrimidine derivatives containing *p*-carboxyphenyl fragment / V.L. Furer, A.S. Agarkov, A.E. Vandyukov, E.R. Gabitova, A.A. Nefedova, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // Structural Chemistry. – 2025. – V. 36. – P. 621-636. <https://doi.org/10.1007/s11224-024-02404-3>

7. Ocherednyuk, E.A. Epichlorohydrin-based CuAAC dendrimers with a calix[4]arene core and polar hydroxyl/oxyethyl terminal groups: synthesis, aggregation and use in catalysis / E.A. Ocherednyuk, E.D. Sultanova, E.G. Makarov, A.A. Fedoseeva, A.A. Khannanov, V.G. Evtugyn, S.E. Solovieva, V.A. Burilov, I.S. Antipin // New Journal of Chemistry. – 2024. – V. 48, №31. – P. 13999-14012. <https://doi.org/10.1039/d4nj02942a>

8. Furer, V.L. DFT study of the conformation, hydrogen bonds, IR, Raman, and NMR spectra of 1,3-disubstituted *p*-*tert*-butylthiacalix[4]arenes / V.L. Furer, A.E. Vandyukov, A.S. Ovsyannikov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin // Journal of Molecular Modeling. – 2023. – V. 29, №4. – Article 97. <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05505-8>

9. Tsuji, N. Predicting highly enantioselective catalysts using tunable fragment descriptors / N. Tsuji, P. Sidorov, Ch. Zhu, Yu. Nagata, T. Gimadiev, A. Varnek, B. List // Angewandte Chemie International Edition. – 2023. – V. 62, №11. – Article e202218659. <https://doi.org/10.1002/anie.202218659>

10. Kondratyev, V. Generative model based on junction tree variational autoencoder for HOMO value prediction and molecular optimization / V. Kondratyev, M. Dryzhakov, T. Gimadiev, D. Slutskiy // Journal of Cheminformatics. – 2023. – V. 15. – Article 11. <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00681-4>

11. Ocherednyuk, E. Synthesis of epichlorohydrin-based click-dendrons with different functional groups / E. Ocherednyuk, V. Burilov, T. Shilyaeva, S. Solovieva,

				<p>I. Antipin // <i>Current Organic Chemistry</i>. – 2023. – V. 27, №11. – P. 979-982. https://doi.org/10.2174/1385272827666230830105808</p> <p>12. Gimadiev, T. CGRdb2.0: a Python database management system for molecules, reactions, and chemical data / T. Gimadiev, P. Sidorov, A. Varnek, R. Nugmanov, A. Fatykhova, T. Madzhidov, A. Khakimova // <i>Journal of Chemical Information and Modeling</i>. – 2022. – V. 62, №9. – P. 2015-2020. https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c01105</p> <p>13. Lin, A. Atom-to-atom mapping: a benchmarking study of popular mapping algorithms and consensus strategies / A. Lin, N. Dyubankova, T.I. Madzhidov, R.I. Nugmanov, J. Verhoeven, T.R. Gimadiev, V.A. Afonina, Z. Ibragimova, A. Rakhimbekova, P. Sidorov, A. Gedich, R. Suleymanov, R. Mukhametgaleev, J. Wegner, H. Ceulemans, A. Varnek // <i>Molecular Informatics</i>. – 2022. – V. 41, №4. – Article 2100138. https://doi.org/10.1002/minf.202100138</p> <p>14. Furer, V.L. DFT study of conformation, hydrogen bonds, IR, and Raman spectra of the sodium salt of <i>p</i>-hexasulfonatocalix[6]arene DFT / V.L. Furer, A.E. Vandyukov, S.R. Kleshnina, S.E. Solovieva, I.S. Antipin, V.I. Kovalenko, // <i>Journal of Molecular Structure</i>. – 2021. – V. 1243. – Article 130892. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130892</p> <p>15. Madzhidov, T.I. Machine learning modelling of chemical reaction characteristics: yesterday, today, tomorrow / T.I. Madzhidov, A. Rakhimbekova, V.A. Afonina, T.R. Gimadiev, R.N. Mukhametgaleev, R.I. Nugmanov, I.I. Baskin, A. Varnek // <i>Mendeleev Communications</i>. – 2021. – V. 31, №6. – P. 769-780. https://doi.org/10.1016/j.mencom.2021.11.003</p>
--	--	--	--	---

Первый проректор – проректор по научной деятельности
 ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный
 университет», проф., д.ф.-м.н.

28.04.2026



Д.А. Тагорский