Сведения о ведущей организации

по диссертации Романовой Ксении Андреевны

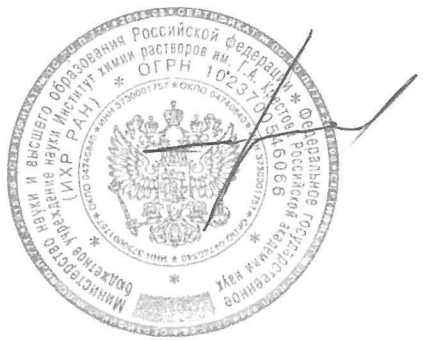
на тему «Квантово-химическое моделирование мезогенных координационных соединений лантаноидов(III) в надмолекулярно-организованных состояниях и полимерных матрицах» на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Полное и сокращенное наименование организации	Почтовый адрес (индекс, город, улица, дом), телефон, адрес электронной почты, адрес официального сайта в сети «Интернет»	Структурное подразделение	Основные работы работников ведущей организации по теме диссертации, опубликованные в рецензируемых научных журналах за последние 5 лет (не более 15 публикаций)
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН)	Адрес: 153045, Российская Федерация, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1, Телефон: +7 (4932) 33-62-59 Факс: +7 (4932) 33 62 65 E-mail: adm@isc-ras.ru WWW: https://www.isc-ras.ru	Научно-исследовательский отдел 1 «Развитие подходов и методов физической химии в исследовании многокомпонентных супрамолекулярных, молекулярных и ион-молекулярных систем как перспективных материалов»	1. Sobornova, V.V. Structural and sorption characteristics of nanocellulose aerogel-based composite materials doped with mefenamic and flufenamic acids: Insights from magic angle spinning and high-pressure NMR spectroscopy / V.V. Sobornova, V.V. Mulloyarova, K.V. Belov, A.A. Dyshin, P.M. Tolstoy, M.G. Kiselev, I.A. Khodov // Journal of Physical Chemistry Letters. – 2025. – Vol. 16. – Is. 26. – P. 6817-6824. 2. Oparin, R.D. A near-infrared spectroscopic study of the conformational equilibria of lidocaine molecules in a highly concentrated lidocaine solution in supercritical CO_2 / R.D. Oparin, M.G. Kiselev // Journal of Molecular Liquids. – 2024. – Vol. 396. – Art. Num. 123916. 3. Shagurin, A. Widom line in supercritical water in terms of changes in local structure: theoretical perspective / A. Shagurin, F.A. Miannay, M.G. Kiselev, P. Jedlovszky, F. Affouard, A. Idrissi // Journal of Physical Chemistry Letters. – 2024. – Vol. 15. – Is. 22. – P. 5831-5837. 4. Khodov, I.A. Does DMSO affect the conformational changes of drug molecules in supercritical CO_2 MEDIA? / I.A. Khodov, K.V. Belov, M.A. Krestyaninov, V.V. Sobornova, A.A. Dyshin, M.G. Kiselev // Journal of Molecular Liquids. – 2023. – Vol. 384. – Art. Num. 122230. 5. Oparin, R.D. Chemometric approaches as an effective way to study conformer populations of lidocaine molecules in supercritical carbon dioxide / R.D. Oparin, M.A. Krestyaninov, M.G. Kiselev // Journal of Molecular Liquids. – 2023. – Vol. 385. – Art. Num. 122441. 6. Khodov, I.A. Exploring the temperature-dependent proportions of lidocaine conformers equilibria in supercritical carbon dioxide via NOESY / I.A. Khodov, K.V. Belov, V.V. Sobornova, A.A. Dyshin, M.G.

			Kiselev // Journal of Molecular Liquids. – 2023. – Vol. 387. – Art. Num. 122620. 7. Belov, K.V. Conformational analysis of flufenamic acid in SC-CO_2 by 2D NOESY / K.V. Belov, A.A. Dyshin, M.A. Krestyaninov, V.V. Sobornova, I.A. Khodov, M.G. Kiselev // Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2023. – Vol. 17. – № 7. – P. 1475-1481. 8. Khodov, I.A. Investigation of the spatial structure of flufenamic acid in supercritical carbon dioxide media via 2D NOESY / I.A. Khodov, K.V. Belov, M.A. Krestyaninov, A.A. Dyshin, M.G. Kiselev // Materials. – 2023. – Vol. 16. – Is. 4. – Art. Num. 1524. 9. Gurina, D.L. Polylactide nanoparticle impregnation with carbamazepine in supercritical media and its subsequent release in liquid solvents: insights from molecular simulation / D.L. Gurina, Y.A. Budkov, M.G. Kiselev // Journal of Molecular Liquids. – 2022. – Vol. 352. – Art. Num. 118758. 10. Oparin, R.D. Role of an intramolecular H-bond in lidocaine conformer distribution and polymorph stability / R.D. Oparin, M.A. Krestyaninov, M.G. Kiselev // Journal of Molecular Liquids. – 2022. – Vol. 360. – Art. Num. 119461. 11. Krestyaninov, M.A. Complex investigation of H-bond in water-n-methylacetamide system: volumetric properties, DFT, IR, MD analysis / M.A. Krestyaninov, D.V. Ivlev, A.A. Dyshin, D.M. Makarov, M.G. Kiselev, A.M. Kolker // Journal of Molecular Liquids. – 2022. – Vol. 360. – Art. Num. 119533. 12. Опарин, Р.Д. Ближняя ИК-спектроскопия как эффективный метод исследования водородного связывания в тройной смеси LiCl–H_2O–CO_2 / Р.Д. Опарин, М.Г. Киселев // Журнал физической химии. – 2022. – Т. 96. – № 4. – С. 510-517. 13. Ходов, И.А. Особенности конформационных равновесий производного тиадиазола в растворителях различной полярности: исследование методами ЯМР / И.А. Ходов, К.В. Белов, М.А. Крестьянинов, М.Г. Киселев // Журнал физической химии. – 2022. – Т. 96. – № 4. – С. 553-561. 14. Дышин, А.А. Диспергирование однослойных углеродных нанотрубок в смесях этанол-холевая кислота: эксперимент и молекулярно-динамическое моделирование / А.А. Дышин, Н.А. Фомина, А.А. Алешонкова, М.С. Кузьмиков, Г.В. Бондаренко, М.Г. Киселев // Журнал физической химии. – 2022. – Т. 96. – № 6. – С. 777-782.

			15. Sobornova, V.V. Molecular dynamics and nuclear magnetic resonance studies of supercritical CO_2 sorption in poly(methyl methacrylate) / V.V. Sobornova, K.V. Belov, A.A. Dyshin, D.L. Gurina, I.A. Khodov, M.G. Kiselev // Polymers. – 2022. – Vol. 14. – Is. 23. – Art. Num. 5332.

Директор Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт химии растворов
им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
доктор химических наук
«09» сентября 2026 г.



Киселев Михаил Григорьевич