

СВЕДЕНИЯ

об официальном оппоненте по диссертации

Мещеряковой Екатерины Сергеевны

«Молекулярная и кристаллическая структура ряда α,ω -алкан-дитиолов, 1,5,3-дителиазепанов и 1,2-бензо-1,5,3-дителиазепинов»

1. Вакулин Иван Валентинович

2. Год рождения: 1971

гражданство: Российская Федерация

3. Почтовый адрес: 450076, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32

телефон (при наличии): 89373333594

адрес электронной почты: vakuliniv@mail.ru

4. Место основной работы, должность:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет», профессор кафедры органической и биоорганической химии

5. Ученая степень:

Доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия)

6. Ученое звание (по специальности, кафедре)

-

7. Основные работы, опубликованные в рецензируемых научных журналах за последние 5 лет (не более 15 публикаций)

1. **Vakulin, I.V.** Semi-empirical methods in RedOx potential calculations of substituted aromatic compounds: Parameterizations, solvation models, approximation by frontier molecular orbital energies / **I.V. Vakulin, D.V. Bugaets, R.A. Zilberg, V.N. Maistrenko** // *Electrochimica Acta*. – 2019. – V.294. – P. 423–430.
2. **Vakulin, I.V.** Features of formation transition states of 1,3-dioxanes by Prins reaction in the pores of synthetic zeolites A and carbon nanotubes / **I.V. Vakulin, R.F. Talipov, P.A. Pasko, G.R. Talipova, O.Y. Kupova,** // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2018. – V. 270. – P. 30–33.

3. Вакулин, И.В. Квантово химическое исследование поверхности потенциальной энергии фотохимической конверсии пиперилена в изопрен. / И.В. Вакулин, Д.С. Миргалеев, Р.Ф. Талипов, П.А. Пасько, Г.Р. Талипова // Бутлеровские сообщения. – 2018. – Т. 53. – №1. – С. 85–90.
4. Югова, А.А. Количественная оценка эффективности синтезов биологически активных соединений / А.А. Югова, М.М. Канчурина, Р.Ф. Талипов, И.В. Вакулин, Р.Р. Шириязданов // Башкирский химический журнал. – 2018. – Т. 25. – № 1. – С. 13–16.
5. Вакулин, И.В. Анализ точности расчета Red/Ox потенциалов замещенных фенолов, хинонов и анилинов полуэмпирическими методами AM1, RM1 и PM7 / И.В. Вакулин, Д.В. Бугаец, Р.А. Зильберг // Бутлеровские сообщения. – 2017. – Т. 52. – № 11. – С. 53–59.
6. Пасько, П.А. Моделирование методами молекулярной динамики влияния цеолитов групп $(\text{Na}^+_x(\text{H}_2\text{O})_y)[\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c]$, $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$, Si_xO_y на образование 1,3-диоксанов по реакции Принса / П.А. Пасько, И.В. Вакулин, Р.Ф. Талипов // Вестник Башкирского университета. – 2017. – Т. 22. – № 4. – С. 966–971.
7. Пасько, П.А. Теоретическое моделирование влияния цеолитов групп $\text{Na}^+_x(\text{H}_2\text{O})_y[\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c]$, $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$, $\text{Al}_a\text{Pb O}_c$ на стабилизацию переходного состояния образования гидрированных пиранов по реакции Принса / П.А. Пасько, И.В. Вакулин, Р.Ф. Талипов // Бутлеровские сообщения. – 2017. – Т. 52. – № 10. – С. 45–49.
8. Фаттахов, А.Х. Индексы реакционной способности аминометилирования алкенов / А.Х. Фаттахов, И.В. Вакулин, Э.Р. Латыпова, Р.Ф. Талипов, А.Р. Галиахметов // Бутлеровские сообщения. – 2017. – Т. 52. – № 11. – С. 60–66.
9. Ishmuratov, G.Yu. Unexpected acidic transformation of allylic menthene sulfoxides into saturated sulfones / G.Yu. Ishmuratov, V.S. Tukhvatshin, M.P. Yakovleva, I.V. Vakulin, R.R. Muslukhov, P.A. Pasko, R.F. // Mendeleev Communications. – 2016. – V. 26. – P. 81–82.

15 апреля 2019 г.



(подпись, заверение)