

СВЕДЕНИЯ О ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

по кандидатской диссертации Ахметьяновой Альбины Ильшатовны выполненной на тему «Теоретико-графовый подход моделирования гомодесмотических реакций для расчета стандартной энтальпии образования органических соединений» по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

1.	Полное наименование организации	Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук
2.	Сокращенное наименование организации	ИНК УФИЦ РАН
3.	Место нахождения	г. Уфа
4.	Почтовый адрес организации с указанием индекса	450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. проспект Октября, д. 141
5.	Телефон с указанием кода города	+7 (347) 284 27 50
6.	Адрес электронной почты	ink@anrb.ru
7.	Адрес официального сайта в сети «Интернет»	http://ink-ran.ru/ru
11.	Список основных публикаций работников ведущей организации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15)	<p>1. Sabirov D., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S. Molecular size and molecular structure: discriminating their changes upon chemical reactions in terms of information entropy // Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2022. Т. 110. С. 108052.</p> <p>2. Sabirov D.S., Shepelevich I.S. Information entropy in chemistry: an overview // Entropy. 2021. Т. 23. № 10.</p> <p>3. Sabirov D.Sh., Shepelevich I. S. A theoretical study of hypothetical silicon analogs of simplest saccharide molecules // Computational and Theoretical Chemistry, 2019, 1168, 112608. doi:10.1016/j.comptc.2019.112608</p> <p>4. Zakirova A.D., Sabirov D.Sh. Volume of the fullerene cages of endofullerenes and hydrogenated endofullerenes with encapsulated atoms of noble gases and nonadditivity of their polarizability // Russian Journal of Physical Chemistry A, 2020, 94, 963-971.</p>

DOI: 10.1134/s0036024420050283.

5. Sabirov D. Sh. Information entropy of mixing molecules and its application to molecular ensembles and chemical reactions // Computational and theoretical chemistry, 2020, 1187. DOI: 10.1016/j.comptc.2020.112933

6. Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Загидуллин Ш.Г., Коледин С.Н., Сабиров Д.Ш. Кинетические закономерности гидрирования полициклических ароматических углеводородов на никелевых катализаторах // Журнал физической химии. 2023. Т. 97. № 10. С. 1398-1405.

7. Koledina K., Gubaydullin I., Koledin S. Parameter analysis of stability of the pareto front for optimal conditions of catalytic processes // Журнал Лобачевского по математике. 2021. Т. 42. № 12. С. 2834-2840.

8. Зайнуллин Р.З., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Ахметов А.Ф., Коледин С.Н.

Кинетическая модель каталитического риформинга бензина с учетом изменения реакционного объема и термодинамических параметров // Кинетика и катализ. 2020. Т. 61. № 4. С. 550-559.

9. Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Koledin S.N. Multicriteria optimization of the catalytic reaction for the synthesis of benzyl butyl ether based on the kinetic model // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2022. Т. 135. № 1. С. 155-167.

10. Enikeeva L.V., Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Faskhutdinov A.G., Faskhutdinova R.I. Modeling and optimization of the catalytic isomerization of the pentane-hexane fraction with maximization of individual high-octane components yield // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2021. Т. 133. № 2. С. 879-895.

11. Сафиуллина Л.Ф., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Зайнуллин Р.З. Исследование математической модели

	каталитического риформинга бензина методами анализа чувствительности // Вычислительные методы и программирование. 2020. Т. 21. № 4. С. 440- 451.
--	--

Председатель диссертационного совета,
д.х.н., профессор



А.Г. Мустафин

Ученый секретарь диссертационного совета,
д.ф.-м.н., доцент

А.С. Исмагилова