

**ПРОФЕССОР ОЛЕГ ВАЛЕРЬЕВИЧ ШИШКИН
(29.07.1966 – 17.07.2014)**

Уважаемые коллеги! С чувством глубокой горечи сообщаем, что химическая наука понесла невосполнимую утрату – на 48 году жизни скоропостижно скончался известный ученый, доктор химических наук, и. о. генерального директора Государственного научного учреждения «Научно-технологический комплекс «Институт монокристаллов» Национальной академии наук Украины, заведующий отделом рентгеноструктурных исследований и квантовой химии, яркий и неординарный человек – Олег Валерьевич Шишкин.

Олег Валерьевич родился 29 июля 1966 г. в пос. Коломак, Харьковская область, Украина, в 1983 г. с отличием окончил среднюю школу г. Валки (Харьковская обл.), а в 1990 г. – химический факультет Харьковского государственного университета, защитив дипломную работу на тему «Молекулярная и кристаллическая структура дигидроазолопиримидинов». Следует отметить, что выбранному научному направлению исследования молекулярной и кристаллической структуры веществ и их свойств Олег Валерьевич посвятил всю свою жизнь.



После окончания аспирантуры при кафедре органической химии Харьковского государственного университета Олег Валерьевич под руководством проф. С. М. Десенко в 1993 г. успешно защитил кандидатскую диссертацию на тему: «Молекулярная структура и конформационный анализ азотсодержащих частично гидрированных колец».

После защиты диссертации Олег Валерьевич Шишкин в период с 1994 по 1997 гг. работал научным и старшим научным сотрудником Института элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова РАН в Лаборатории рентгеноструктурного анализа (г. Москва). Во время своей работы в ИНЭОС РАН Олег Валерьевич в 1995 году проходил стажировку в Ноттингемском университете, г. Ноттингем, Великобритания.

В 1997 году, после возвращения в Украину, Олег Валерьевич Шишкин был принят на работу в Институт монокристаллов НАН Украины на должность младшего научного сотрудника, затем – ученого секретаря, и, пройдя с этой научной организацией весь путь ее многочисленных преобразований, в 2011 г. стал генеральным директором Государственного научного учреждения «Научно-технологический комплекс «Институт монокристаллов» НАН Украины.

Докторскую диссертацию на тему «Молекулярная структура и конформационный анализ шестичленных дигидроциклов» Олег Валерьевич Шишкин успешно защитил в 1999 году.

Благодаря своим неординарным организаторским способностям и искренней заинтересованности в научных результатах, он смог успешно совместить эффективную административную работу со столь же эффективной научной деятельностью. Отдел рентгеноструктурных исследований и квантовой химии, который был создан в 1998 г. при активном участии Олега Валерьевича и который он возглавлял все эти годы, не имеет аналогов в Украине и является одним из сильнейших научных подразделений в данной области на просторах СНГ.

Олег Валерьевич Шишкин – признанный специалист в области органической, квантовой и компьютерной химии. Круг его научных интересов был чрезвычайно широк и охватывал актуальные проблемы, касающиеся молекулярной и кристаллической структуры разнообразных соединений и материалов, изучения конформационных характеристик и динамики органических молекул, анализа характера и природы межмолекулярных взаимодействий в молекулярных комплексах и кристаллах. Им был предложен новый подход к анализу супрамолекулярной архитектуры молекулярных кристаллов, который основывается на изучении топологии и энергетики межмолекулярных взаимодействий. Олег Валерьевич активно сотрудничал с учеными из научных институтов и университетов Украины, России, США, Польши, Германии, Франции и других стран мира.

Автор и соавтор более 1000 научных работ О. В. Шишкин входил в двадцатку наиболее цитируемых украинских ученых.

Важное значение Олег Валерьевич придавал популяризации науки в обществе, неоднократно выступал в СМИ с интервью и аналитическими статьями, посвященными вопросам как усовершенствования организации научной деятельности в современных условиях в целом, так и с информацией о конкретных научных достижениях и разработках Комплекса, который возглавлял. Кроме того, одной из главнейших задач считал привлечение к научной деятельности молодежи, поэтому всецело поддерживал молодых ученых в их исследовательской работе, с энтузиазмом и большой самоотдачей занимался преподавательской работой в Харьковском национальном университете им. В. Н. Каразина, подготовкой аспирантов.

Он ушел от нас полный творческих замыслов, созидательной энергии, чрезвычайно эрудированный, высочайшего класса профессионал, увлекающийся и неравнодушный, великого доброго сердца Человек.

Светлая память о нашем любимом друге и соратнике Олеге Валерьевиче Шишкине никогда нас не покинет, придаст нам силы вынести этот сокрушительный удар судьбы, и вместе с этим – оказаться достойными памяти этого замечательного Человека.

*проф. В. А. Чебанов,
проф. С. М. Десенко*

PROFESSOR OLEG VALERYEVICH SHISHKIN
(29.07.1966–17.07.2014)

Dear colleagues! Chemical community is grieving over the tragic loss of a renowned scientist, Dr. Sc. (Chemistry), Acting General Director of the SSI “Institute for Single Crystals” of National Academy of Sciences of Ukraine, Head of Department of X-ray Diffraction Studies and Quantum Chemistry, an outstanding and most extraordinary man – Professor Oleg Valeryevich Shishkin who passed away at the age of 47.

Professor Oleg Shishkin was born on July 29, 1966 in Kolomak (Kharkiv Region, Ukraine). In 1983 he graduated from Valki (Kharkiv Region) high school with honor, and on 1990 graduated from Kharkiv State University (Department of Chemistry) with diploma thesis devoted to Molecular and Crystal Structure of Dihydroazolopyrimidines. Subsequently, Prof. Oleg Shishkin dedicated his entire life to the study of molecular and crystalline structure and properties of substances.

Upon the completion of the PhD course at the Department of Organic Chemistry of Kharkiv State University under the guidance of Prof. S. M. Desenko in 1993, Oleg Shishkin successfully presented thesis titled “Molecular Structure and Conformation Analysis of Nitrogenous Partially Hydrogenated Rings”.

In 1994-1997, Oleg Shishkin made a career from research associate to senior researcher at the X-ray Structure Analysis Laboratory of the A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds (INEOS) of Russian Academy of Sciences (Moscow). In 1995, during his tenure at the INEOS RAN, Oleg Shishkin took his fellowship at the University of Nottingham (the U.K.).

Upon returning to Ukraine in 1997, Oleg Shishkin continued his research at the Institute for Single Crystals of the National Academy of Sciences of Ukraine at the position of the junior researcher and then as academic secretary. Passing together with the Institute through all the reorganizations and trials, he became in 2011 the Acting General Director of the SSI “Institute for Single Crystals” of the National Academy of Sciences of Ukraine.

In 1999, Oleg Shishkin got his habilitation by successfully presenting thesis titled “Molecular Structure and Conformational Analysis of Hexatomic Dihydrocycles”.

Exceptional organizational skills and genuine commitment to scientific creativity helped him combine the efficient administrative work with equally efficient scientific activities. Founded in 1998 with active participation of and headed by Prof. Oleg Shishkin, the Department of X-ray Diffraction Studies and Quantum Chemistry quickly became a leader in Ukraine and one of the top-notch scientific groups throughout the C.I.S.

Prof. Oleg Shishkin is a renowned expert in organic, quantum and computer chemistry. His scientific interests extended to top hot problems of molecular and crystal structure of most diverse compounds and materials, study of conformational properties and dynamics of organic molecules, analysis of the character and the nature of intermolecular interaction in molecular complexes and crystals. He is the author of the innovative approach to the analysis of supramolecular architecture of molecular crystals that is based on the study of the topology and energy of intermolecular interaction. Prof. Shishkin actively cooperated with scientists representing scientific institutes and universities of Ukraine, Russia, the United States, Poland, Germany, France, etc.

As an author and co-author of over 1,000 papers, Professor Shishkin was one of the Top-20 cited Ukrainian scientists.

Professor Shishkin strongly believed in popularization of science, gave numerous interviews to mass media and wrote a lot of analytical articles dedicated to organizational improvement of scientific activities in contemporary conditions, giving updates on specific scientific achievements and projects of the Institution he was in charge of. In addition, he considered it crucial to involve the youth in scientific activities and, therefore, provided strong assistance to the young researchers, enthusiastically and with ultimate commitment taught at the V. N. Karazin National University of Kharkiv and trained PhD students.

He left us full of creative ideas, creative energy, extremely erudite, high-class professional, enthusiast and caring, a Great Man with a good heart.

Fond memories of Professor Oleg Shishkin – our beloved friend and colleague – will keep on inspiring us and give us strength to overcome this terrible misfortune and become worthy successors of this honorable Man.

Prof. V. A. Chebanov

Prof. S. M. Desenko

ИЗБРАННЫЕ ПУБЛИКАЦИИ / SELECTED PUBLICATIONS

1. Kappe C.O.; **Shishkin O.V.**; Uray, G.; Verdino P. / Synthesis and reactions of Biginelli compounds, part 19 - X-ray structure, conformational analysis, enantioseparation, and determination of absolute configuration of the mitotic kinesin Eg5 inhibitor monastrol // TETRAHEDRON, 2000, Vol. 56, Issue13, pp.1859-1862.

2. **Shishkin O.V.** ; Pelmenschikov A.; Hovorun D.M.; Leszczynski J. / Molecular structure of free canonical 2'-deoxyribonucleosides: a density functional study // JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 2000, Vol. 526, pp. 329-341.

3. **Shishkin O.V.**; Gorb L.; Leszczynski J. Does the hydrated cytosine molecule retain the canonical structure? A DFT study / JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 2000, Vol. 104, Issue: 22, pp. 5357-5361.

4. Sukhanov O.S.; **Shishkin O.V.**; Gorb L.; Podolyan Y.; Leszczynski J. / Molecular structure and hydrogen bonding in polyhydrated complexes of adenine: A DFT study // JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 2003, Vol. 107, Issue: 12, pp. 2846-2852;

5. Nesterov D.S.; Kokozay V.N.; Dyakonenko V.V.; **Shishkin O.V.** Jezierska J.; Ozarowski A.; Kirillov A.M.; Kopylovich M.N.; Pombeiro A.J.L. / An unprecedented heterotrimetallic Fe/Cu/Co core for mild and highly efficient catalytic oxidation of cycloalkanes by hydrogen peroxide // CHEMICAL COMMUNICATIONS, 2006, Issue: 44, pp. 4605-4607.

6. Shishkina S.; **Shishkin O.**; Desenko S.; Leszczynski J. / Conjugation and hyperconjugation in conformational analysis of cyclohexene derivatives containing an exocyclic double bond // THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, A, 2008, 112 (30), pp. 7080-7089.

7. **Shishkin O.** / Evaluation of true energy of halogen bonding in the crystals of halogen derivatives of trityl alcohol // CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 2008, 458 (1-3), pp. 96-100,

8. Zubatyuk R.; **Shishkin O.**;Gorb L.; Leszczynski J. // Homonuclear versus heteronuclear resonance-assisted hydrogen bonds: tautomerism, aromaticity, and intramolecular hydrogen bonding

in heterocyclic systems with different exocyclic proton donor/acceptor // THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, A, 2009, 113 (12), pp. 2943-2952.

9. Furmanchuk A.; **Shishkin O.**; Isayev O.; Gorb L. Leszczynski J. / New insight on structural properties of hydrated nucleic acid bases from ab initio molecular dynamics // PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 2010, 12 (33), pp. 9945-9954.

10. **Shishkin O.**; Zubatyuk R.; Dyakonenko V.; Lepetit C.; Chauvin R. / The C-Cl π interactions inside supramolecular nanotubes of hexaethynylhexamethoxy[6]pericyclyne // Physical chemistry chemical physics, 2011, 13 (15), pp. 6837-6848.

11. **Shishkin O.**; Dyakonenko V.; Maleev A.; Schollmeyer D.; Vysotsky M. / Columnar supramolecular architecture of crystals of 2-(4-Iodophenyl)-1,10-phenanthroline derived from values of intermolecular interaction energy // CRYSTENGCOMM, 2011, 13 (3), pp. 800-805.

12. Furmanchuk A.; Isayev O.; Gorb L.; **Shishkin O.V.**; Hovorun D.M.; Leszczynski J. / Novel view on the mechanism of water-assisted proton transfer in the DNA bases: bulk water hydration // PHYS.CHEM.CHEM.PHYS., 2011, v. 13, №10, pp. 4311-4318.

13. **Shishkin O.V.**; Dyakonenko V.V.; Maleev A.V. / Supramolecular architecture of crystals of fused hydrocarbons based on topology of intermolecular interactions // CRYSTENGCOMM, 2012, v. 14, №5, pp.1795-1794.

14. **Shishkin O.V.**; Shishkina S.V. / Unusual properties of usual molecules. Conformational analysis of cyclohexene, its derivatives and heterocyclic analogues // Eds. J. Leszczynski and M. K. Shukla. – New York: Springer, 2012. pp. 557-578.

15. **Shishkin Oleg V.**; Medvediev V. V.; Zubatyuk R.I. / Supramolecular architecture of molecular crystals possessing shearing mechanical properties: columns versus layers // CRYSTENGCOMM, 2013, v. 15, №1, pp. 160-167.

16. **Shishkin O.V.**; Dopieralski P.; Omelchenko I.V.; Gorb L.; Latajka Z.; Leszczynski J / Entropy versus aromaticity in the conformational dynamics of aromatic rings // J.MOL.MODEL. 2013, v.19, №10, pp. 40734077.

17. Zubatiuk T.A.; **Shishkin O.V.**; Gorb L.; Hovorun D.M.; Leszczynski J. / B-DNA characteristics are preserved in double stranded d(A)₃·d(T)₃ and d(G)₃·d(C)₃ mini-helices: conclusions from DFT/M06-2X study // PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 2013, v. 15, N 41, pp. 18155–18166.

18. Merz K.; Evers M.V.; Uhl F.; Zubatyuk R.I.; **Shishkin O.V.** / Role of CHF₂- and CF₃-substituents on molecular arrangement in the solid state: Experimental and theoretical crystal structure analysis of CH₃/CHF₂/CF₃-substituted benzene // CRYSTAL GROWTH AND DESIGN, 2014, Vol. 14, Issue 6, pp. 3124-3130.

19. Walewski L.; Dopieralski P.; **Shishkin O.V.**; Latajka Z. / Quantum delocalization of benzene in the ring puckering coordinates // INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY, 2014, Vol. 114, Issue 8, pp. 534-542

20. **Shishkin O.V.**; Zubatyuk R.I.; Shishkina S.V.; Dyakonenko V.V.; Medvediev V.V. / Role of supramolecular synthons in the formation of the supramolecular architecture of molecular crystals revisited from an energetic viewpoint // PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 2014, Vol. 16, Issue 14, pp 6773-6786.