

CURRICULUM VITAE

Mariia Shyshkina

PERSONAL:

Born: June 17, 1996; Shostka, Ukraine

Citizenship Ukraine

Affiliation: Institute of Functional Materials Chemistry State Scientific Institution
"Institute for Single Crystals" of National Academy of Sciences of Ukraine
(Nauky Ave. 60, Kharkiv, Ukraine, 61072)

Positions: Junior researcher

Phone / Fax +38-066-58-326-32;

E-mail: masha.o.shishkina@gmail.com

EDUCATION AND ACADEMIC STATUSES:

Master`s degree Chemistry, June 2020, Karazin Kharkiv National University

PROFESSIONAL CAREER:

September 2014 – **Student**, Karazin Kharkiv National University

June 2020

August 2017 – **Senior Assistant**, Laboratory of Pharmacopeial Analysis, State Enterprise
November 2020 “Ukrainian Scientific Pharmacopeial Center for the Quality of Medicines”,
Kharkiv, Ukraine

November 2020 – **present time** **Postgraduate Student**, Department of Organic and Bioorganic Chemistry,
Institute of Functional Materials Chemistry State Scientific Institution
"Institute for Single Crystals" of National Academy of Sciences of Ukraine

November 2020 – June 2021 **Lead Engineer**, Department of Organic and Bioorganic Chemistry, Institute
of Functional Materials Chemistry State Scientific Institution "Institute for
Single Crystals" of National Academy of Sciences of Ukraine

July 2021 – **present time** **Junior Researcher**, Department of Organic and Bioorganic Chemistry,
Institute of Functional Materials Chemistry State Scientific Institution
"Institute for Single Crystals" of National Academy of Sciences of Ukraine

RESEARCH INTERESTS:

Studying of electron density distribution in organic compounds. Investigation of the molecular and crystalline structure of organic compounds using X-ray structural analysis and quantum-chemical methods.

AWARDS, GRANTS AND SCHOLARSHIPS:

2023 – Project of National Research Foundation of Ukraine №2020.02/0183 (“Study of polymorphic transitions of molecular crystals for the needs of the pharmaceutical industry”).

CURRICULUM VITAE

Mariia Shyshkina

MORE INFORMATION (publications, conferences)

Examples of publications.

1. **M. O. Shyshkina**, D. A. Lega, V. D. Goryachiy, L. M. Shemchuk, D. V. Levashov, L. A. Shemchuk. 2-Amino-4-(4-chloro-1-ethyl-2,2-dioxo-1Hbenzo[c][1,2]thiazin-3-yl)-7,7-dimethyl-5-oxo-5,6,7,8-tetrahydro-4Hchromene-3-carbonitrile: single-crystal X-ray diffraction study and Hirshfeld surface analysis. *Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications*, 2021, **77** (3), 294-297. <https://doi.org/10.1107/S2056989021002085>.
2. **M. O. Shyshkina**, Y. I. Sakhno, O. V. Radchenko, S. V. Shishkina, S. M. Desenko, V. A. Chebanov. N-tert-Butyl-2-{2-[2-(4-chlorophenyl)-4hydroxy-1-(5-methylisoxazol-3-yl)-5-oxo-2,5-dihydro-1H-pyrrol-3-yl]N-(4-methoxyphenyl)acetamido}-2-(4-methoxyphenyl)acetamide methanol monosolvate: single-crystal X-ray diffraction study and Hirshfeld surface analysis. *Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications*, 2021, **77** (12), 1208-1212. <https://doi.org/10.1107/S2056989021011312>.
3. **M. O. Shyshkina**, S. V. Shishkina, K. S. Ostras, N. Y. Gorobets, V. A. Chebanov, S. M. Desenko. The first coordination complex of (5R,6R,7S)5-(furan-2-yl)-7-phenyl-4,5,6,7-tetrahydro-[1,2,4]triazolo[1,5 α]pyrimidin-6-amino with zinc(II)acetate-chloride. *Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications*, 2021, **77** (12), 1323-1326. <https://doi.org/10.1107/S2056989021012226>.
4. **M. O. Shyshkina**, D. A. Lega, L. M. Shemchuk, I. L. Starchikova, L. A. Shemchuk. 3,3'-(Phenylmethylene)bis(1-ethyl-3,4-dihydro-1H2,1-benzothiazine-2,2,4-trione): single-crystal X-ray diffraction study, quantum-chemical calculations and Hirshfeld surface analysis. *Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications*, 2023, **79** (4), 349-355. <https://doi.org/10.1107/S2056989023002505>.
5. Ya. Sakhno, O. Radchenko, V. Saraev, Yu. Shliapkina, M. Kaidash, **M. Shyshkina**, S. Shishkina, V. Musatow, S. Desenko, V. Chebanov. Temperature Controlled Diastereoselective Doebner/Ugi Tandem Reaction. *SynOpen*, 2023, **7**, 258-266. <https://doi.org/10.1055/a-2091-7934>.
6. S. V. Shishkina, A. M. Shaposhnyk, V. V. Dyakonenko, **M. O. Shyshkina**, S. M. Kovalenko. Use of quantum chemical methods to studying of concomitant polymorphs of diparmacophoric 4-(1H-benzo[d]imidazole-2-yl)-1-(2-methoxyphenyl)-1H-1,2,3-triazol-5-amine. *CrystEngComm*, 2024, **26**, 1481-1493. <https://doi.org/10.1039/D3CE01152F>.
7. **M. O. Shyshkina**, S. M. Desenko. Oxidation process of 1,4-dihydropyridine, 1,4-dihydropyrimidine and pyrrolo-1,4-dihydropyrimidine: quantum chemical study. *Structural Chemistry*, 2024, **35**, 993-1002. <https://doi.org/10.1007/s11224-024-02284-7>.
8. **M. O. Shyshkina**, S. M. Desenko. Oxidation reaction of dihydroazolopyridines: quantum chemical study. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 2025, **38**, e70016. <https://doi.org/10.1002/poc.70016>.
9. P. V. Mormylo, **M. O. Shyshkina**, N. M. Kolos, A. S. Konstantynova, O. V. Borisov, M. Yu. Gorobets. Stereochemical aspects of a Biginelli-like reaction involving cyclohexanone and 3-amino-1H-1,2,4-triazole. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2025, **61** (5/6).

Conferences:

1. **M. Shyshkina**, D. Lega, L. Shemchuk, I. Starchikova, L. Shemchuk. Combination of quantum-chemical calculations and X-ray diffraction study for investigation of tautomerism // 64 Polish Crystallographic Meeting, 5-7 July 2023, Wrocław, Poland, B-26.

CURRICULUM VITAE

Mariia Shyshkina

2. **Шишкіна М.О.**, Десенко С.М. Квантово-хімічне моделювання процесів електронного переносу в процесі окиснення частково гідрованих нітрогеновмісних гетероциклів // XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених студентів та аспірантів з актуальних питань хімії. 10–12 жовтня 2023, Харків, Україна. – с. 18, **(oral presentation)**.
3. **Шишкіна М.О.**, Десенко С.М. Квантово-хімічне дослідження процесу окиснення дигідроазолопіримідинів // VI Українська наукова конференція «Кухарівські хімічні читання - 2024». 28-29 листопада 2024, Київ, Україна, **(oral presentation)**.
4. **Шишкіна М.О.**, Десенко С.М. Дигідроазолопіримідини: квантово-хімічне вивчення процесу окиснення // IX Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи». 9 квітня 2025, Житомир, Україна, с. 308-309, **(oral presentation)**.
5. **Шишкіна М.О.**, Десенко С.М. Квантово-хімічне дослідження процесу окиснення дигідроазолопіридинів // IX Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи». 9 квітня 2025, Житомир, Україна, с. 310-311, **(oral presentation)**.
6. **Шишкіна М.О.**, Десенко С.М. Квантово-хімічне моделювання гетероароматизації дигідроазолопіридинів та дигідроазолопіримідинів // XVII Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські читання - 2025». 29 квітня 2025, Харків, Україна, **(oral presentation)**.