

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Бойченко Антона Николаевича
«Развитие методов моделирования процессов электронной эмиссии при
фотовозбуждении молекулярных анионов»

1. Ф.И.О.: Трофимов Александр Борисович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: 02.00.04 Физическая химия

Должность: Ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Иркутский государственный университет", лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем

Адрес места работы: Иркутск, ул. Карла Маркса, 1 г. Иркутск, 664003.

Тел. +7 (3952) 33-21-76

E-mail atrof@math.isu.runnet.ru

Список основных научных публикаций по специальности и/или проблематике
оппонируемой диссертации за последние 5 лет:

1. A.D. Skitnevskaya, K. Gokhberg, A.B. Trofimov, A.I. Kuleff, L.S.Cederbaum. Two-Sided Impact of Water on the Relaxation of Inner-Valence Vacancies of Biologically Relevant Molecules // // J. Chem. Phys. Lett. – 2023. – V. 14 – P. 1418–1426.
2. A.B. Trofimov, A.D. Skitnevskaya, E.K. Grigorieva, E.V. Gromov, H. Köppel. Vibronic coupling in the ground and excited states of the imidazole radical cation // J. Chem. Phys.– 2022.– V. 157. – P. 174309-1-174309-16.
3. A. L. Dempwolff, A. M. Belogolova, A. B. Trofimov, A. Dreuw. Intermediate state representation approach to physical properties of molecular electron-attached states: Theory, implementation, and benchmarking // J. Chem. Phys.– 2021.– V. 154. – P. 104117-1-104117-16.
4. A. L. Dempwolff, A. M. Belogolova, T. Sommerfeld, A. B. Trofimov, A. Dreuw. CAP/EA-ADC method for metastable anions: Computational aspects and application to π^* resonances of norbornadiene and 1,4-cyclohexadiene // J. Chem. Phys.– 2021.– V. 155.– P. 054103-1- 054103-13.
5. M. Patanen, A.R. Abid, S.T. Pratt, A. Kivimäki, A.B. Trofimov, A.D. Skitnevskaya, E.K. Grigorieva, E.V. Gromov, I. Powis, D.M.P. Holland. Valence shell photoelectron angular distributions and vibrationally resolved spectra of imidazole: A combined experimental-theoretical study // J. Chem Phys. – 2021. –V. – P. 054304-1-054304-16.

2. Ф.И.О.: Зайцевский Андрей Вениаминович

Ученая степень: доктор физико-математических наук,

Ученое звание: доцент

Научная специальность: 02.00.17 - Математическая и квантовая химия

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра лазерной химии.

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.3.

Тел.:+7 (495) 939-28-25

E-mail: zaitsevskii_av@pnpi.nrcki.ru

1. A.V. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, N.S. Mosyagin, T. Isaev, R. Berger, A.A. Breier, T.F. Giesen. Accurate ab initio calculations of RaF electronic structure appeal to more laser-spectroscopical measurements // J. Chem. Phys.– 2022.– V. 156. – P. 044306-1- 044306-7.
2. N.S. Mosyagin, A.V. Oleynichenko, A. V. Zaitsevskii, A.V. Kudrin, E.A. Pazyuk, A.V. Stolyarov. Ab initio relativistic treatment of the $a^3\Pi-X^1\Sigma^+$, $a'^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ and $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ systems of the CO molecule // J. Quant. Spectr. Radiat. Trans. – 2021.– V. 263. – P. 107532.
3. D.E. Maison, L.V. Skripnikov, A.V. Oleynichenko, A.V. Zaitsevskii. Axion-mediated electron–electron interaction in ytterbium monohydroxide molecule // J. Chem. Phys.– 2021.– V. 154. – P. 224303-1- 224303-5.
4. S. Kozlov, E. Bormotova, A. Medvedev, E. Pazyuk, A. Stolyarov, A. Zaitsevskii. A first principle study of the spin-orbit coupling effect in the LiM (M = Na,K,Rb,Cs) molecules // Phys. Chem Chem. Phys– 2020.– V. 22. – P. 2295- 2306.
5. N.S. Mosyagin, A.V. Zaitsevskii, A.V. Titov. Generalized relativistic effective core potentials for superheavy elements // Int. J. Quant. Chem – 2020.– V. 120. – P. – e26076

3. Ф.И.О.: Медведев Эмиль Самуилович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

Научная специальность: 01.04.17 - Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Федеральный исследовательский центр химической физики и медицинской химии РАН, теоретический отдел

Адрес места работы: пр-кт акад. Семенова, д.1, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Московская обл., 142432.

E-mail: medvedev@icp.ac.ru

1. E.S. Medvedev, V.G. Ushakov. Effect of the analytical form of the dipole-moment function on the rotational intensity distributions in the high-overtone vibrational bands of carbon monoxide // J. Quant. Spectr. Radiat. Trans. – 2021.– V. 272. – P. 107803.
2. E.S. Medvedev, V.G. Ushakov, E.K. Conway, A. Upadhyay, I.E. Gordon Iouli, J. Tennyson. Empirical normal intensity distribution for overtone vibrational spectra of triatomic molecules // J. Quant. Spectr. Radiat. Trans. – 2020.– V. 252. – P. 107084.
3. V.G. Ushakov, V.V. Meshkov, A.Yu. Ermilov, A.V. Stolyarov, I.E. Gordon, E.S. Medvedev. Long-range potentials and dipole moments of the CO electronic states converging to the ground dissociation limit // Phys. Chem Chem. Phys – 2020.– V. 22. – P. 12058-12067.

4. V.G. Ushakov, V.I. Osherov E.S. Medvedev, Analytical S-matrix derivation in the theory of the nonhydrogenic Stark effect // J. Quant. Spectr. Radiat. Trans. – 2019.– V. 52. – P. 385302
5. V.V. Meshkov, A.V. Stolyarov, A.Yu. Ermilov, E.S. Medvedev, V.G. Ushakov, I.E. Gordon // J. Quant. Spectr. Radiat. Trans. – 2018.– V. 217. – P. 262-273

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.3,
М.И. Шилина