

Сведения о научном руководителе

диссертации Смирновой Анастасии Андреевны

«Моделирование комплексообразования и радиоллиза экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива на основе концепции локальной реакционной способности»

Научный руководитель: Митрофанов Артём Александрович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: -

Должность: старший научный сотрудник кафедры радиохимии Химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Место работы: Химический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

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

Тел.: 8(495)939-32-20

E-mail: mitrofjr@gmail.com

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.13 - Радиохимия за последние 5 лет:

- 1) Egorova Bayirta V., Zamurueva Lyubov S., Zubenko Anastasia D., Pashanova Anna V., Mitrofanov Artem A., Priselkova Anna B., Fedorov Yuri V., Trigub Alexander L., Fedorova Olga A., Kalmykov Stepan N. // Novel Hybrid Benzoazacrown Ligand as a Chelator for Copper and Lead Cations: What Difference Does Pyridine Make. 2022. *Molecules*. V.27. P. 3115.
- 2) Mitrofanov Artem, Andreadi Nikolai, Korolev Vadim, Kalmykov Stepan. // A search for a DFT functional for actinide compounds. 2021. *Journal of Chemical Physics*. V.155. P.161103.
- 3) Mitrofanov Artem, Andreadi Nikolai, Matveev Petr, Zakirova Gladis, Borisova Nataliya, Kalmykov Stepan, Petrov Vladimir // An(III)/Ln(III) solvent extraction: Theoretical and experimental investigation of the role of ligand conformational mobility. 2021. *Journal of Molecular Liquids*
- 4) Mitrofanov Artem A., Matveev Petr I., Yakubova Kristina V., Korotcov Alexandru, Sattarov Boris, Tkachenko Valery, Kalmykov Stepan N. // Deep Learning Insights into Lanthanides Complexation Chemistry. 2021 *Molecules*. V. 26. P.3237.
- 5) Andreadi Nikolai, Mitrofanov Artem, Eliseev Artem, Matveev Petr, Kalmykov Stepan, Petrov Vladimir. // PyRad: A software shell for simulating radiolysis with Qball package. 2021. *Journal of Computational Chemistry*. P.1-7.
- 6) Andreadi Nikolai, Mitrofanov Artem, Matveev Petr, Volkova Anna, Kalmykov Stepan. // Heavy-Element Reactions Database (HERDB): Relativistic ab Initio Geometries and Energies for Actinide Compounds. 2020. *Inorganic Chemistry*.
- 7) Matazova Ekaterina V., Egorova Bayirta V., Konopkina Ekaterina A., Aleshin Gleb Yu, Zubenko Anastasia D., Mitrofanov Artem A., Karpov Kirill V., Fedorova Olga A., Fedorov Yuri V., Kalmykov Stepan N. // Benzoazacrown compound: a highly effective chelator for therapeutic bismuth radioisotopes. 2019. *MedChemComm*. V.10. P.1641-1645.
- 8) Eremin Nickolay N., Marchenko Ekaterina I., Petrov Vladimir G., Mitrofanov Artem A., Ulanova Amina S. // Solid solutions of monazites and xenotimes of lanthanides and plutonium: Atomistic model of crystal structures, point defects and mixing properties. 2019. *Computational Materials Science*. V.157. P.43-50.
- 9) Egorova B.V., Matazova E.V., Mitrofanov A.A., Aleshin G.Yu, Trigub A.L., Zubenko A.D., Fedorova O.A., Fedorov Yu V., Kalmykov S.N. // Novel pyridine-containing azacrown-ethers for the chelation of therapeutic bismuth radioisotopes: complexation study, radiolabeling, serum stability and biodistribution. *Nuclear Medicine and Biology*. V.60. P.1

10)Konstantin Maslakov, Yury Teterin, Mikhail Ryzhkov, Alexej Popel, Anton Teterin, Kirill Ivanov, Artem Mitrofanov, Stepan Kalmykov, Vladimir Petrov, Peter Petrov, Ian Farnan. // The XPS structure and the peculiarities of the chemical bond nature in CeO₂. Czech Chemical Society Symposium Series. V.16. P.227-227.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.014.6,
к.х.н.

Северин А.В.

