

Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Сударьковой Светланы Михайловны
«Строение и динамика незамещенных и фторированных биарильных
систем в электроновозбужденных состояниях»

Ф.И.О.: Зайцевский Андрей Вениаминович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник/доцент

Научная специальность: 02.00.17 – Математическая и квантовая химия

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, кафедра лазерной химии

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

Тел.: +7 (495) 939-28-25

E-mail: zaitsevskii_av@pnpi.nrcki.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. A.V. Oleynichenko, L.V. Skripnikov, **A.V. Zaitsevskii**, V.V. Flambaum. Laser-coolable AcOH^+ ion for CP-violation searches // *Phys. Rev. A.* – 2022. – V. 105. – P. 022825.
2. T.A. Isaev, **A.V. Zaitsevskii**, A.V. Oleynichenko, E. Eliav, A.A. Breier, T.F. Giesen, R.F. Garcia Ruiz, R. Berger. Ab initio study and assignment of electronic states in molecular RaCl // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2021. – V. 269. – P. 107649.
3. **A.V. Zaitsevskii**, A.V. Oleynichenko, E. Eliav. Finite-field calculations of transition properties by the Fock space relativistic coupled cluster method: transitions between different Fock space sectors // *Symmetry* – 2020. – V. 12. – P. 1845.
4. A.V. Oleynichenko, L.V. Skripnikov, **A.V. Zaitsevskii**, E. Eliav, V.M. Shabaev. Diagonal and off-diagonal hyperfine structure matrix elements in KCs within the relativistic Fock space coupled cluster theory // *Chem. Phys. Lett.* – 2020. – V. 756. – P. 137825.

5. S.V. Kozlov, E.A. Bormotova, A.A. Medvedev, E.A. Pazyuk, A.V. Stolyarov, **A.V. 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.

Ф.И.О.: Надточенко Виктор Андреевич

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная(ые) специальность(и): 02.00.15 – Химическая кинетика и катализ

Должность: директор

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук, дирекция

Адрес места работы: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4

Тел. : +7 (499) 137-66-76

E-mail: nadtochenko@chph.ras.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. D.A. Cherepanov, A.Yu. Semenov, M.D. Mamedov, A.V. Aybush, F.E. Gostev, I.V. Shelaev, V.A. Shuvalov, **V.A. Nadtochenko**. Current state of the primary charge separation mechanism in photosystem I of cyanobacteria // *Biophys. Rev.* – 2022. – V. 14. – P. 805-820.
2. A.A. Astafiev, A.M. Shakhov, A.G. Tskhovrebov, A. Shatov, A. Gulin, D. Shepel, **V.A. Nadtochenko**. Nitrogen-Doped Carbon Nanodots Produced by Femtosecond Laser Synthesis for Effective Fluorophores // *ACS Omega* – 2022. – V. 7. – P. 6810-6823.
3. A.A. Astafiev, A.M. Shakhov, A.S. Kritchenkov, V.N. Khrustalev, D.V. Shepel, **V.A. Nadtochenko**, A.G. Tskhovrebov. Femtosecond laser synthesis of nitrogen-doped luminescent carbon dots from acetonitrile // *Dyes Pigm.* – 2021. – V. 188. – P. 109176.
4. V.V. Volchikov, M.N. Khimich, M.V. Rusalov, F.E. Gostev, I.V. Shelaev, **V.A. Nadtochenko**, V.A. Kuzmin, A.A. Kostyukov, A.E. Egorov, M.Ya. Melnikov. Intramolecular photo-driven charge transfer in a series of pyridyl substituted phenyloxazoles. Structural relaxation in meta-substituted ethylpyridinium

derivative of phenyloxazole // Photochem. Photobiol. Sci. – 2021. – V. 20. – P. 1419-1428.

5. D.A. Cherepanov, I.V. Shelaev, F.E. Gostev, A. Petrova, A.V. Aybush, **V.A. Nadtochenko**, W. Xu, J.H. Golbeck, A.Yu. Semenov. Primary charge separation within the structurally symmetric tetrameric $\text{Chl}_{2A}\text{P}_A\text{P}_B\text{Chl}_{2B}$ chlorophyll exciplex in photosystem I // J. Photochem. Photobiol. B – 2021. – V. 217. – P. 112154.
6. V.V. Volchkov, T.P. Matryanov, M.N. Khimich, M.V. Rusalov, D.A. Neznaeva, F.E. Gostev, I.V. Shelaev, **V.A. Nadtochenko**, M.Ya. Melnikov, A.A. Moiseeva, E.N. Ushakov, S.P. Gromov. Ultrafast excited state dynamics, direct and back [2 + 2]-cross-photocycloaddition of a styryl dye–stilbene charge transfer complex // Dyes Pigm. – 2021. – V. 185. – P. 108952.
7. A.S. Shigaev, T.B. Feldman, **V.A. Nadtochenko**, M.A. Ostrovsky, V.D. Lakhho. Quantum-classical model of the rhodopsin retinal chromophore cis-trans photoisomerization with modified inter-subsystem coupling // Comput. Theor. Chem. – 2020. – V. 1181. – P. 112831.

Ф.И.О.: Ананьев Иван Вячеславович

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: без ученого звания

Научная специальность: 02.00.04 – Физическая химия

Должность: заведующий лабораторией квантовой химии

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт Общей и Неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук, лаборатория квантовой химии

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 31

Тел.: +7 (495) 775-65-85 (доб. 334)

E-mail: ananyev@ineos.ac.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. A.A. Anisimov, **I.V. Ananyev**. Interatomic exchange-correlation interaction energy from a measure of quantum theory of atoms in molecules topological bonding: a diatomic case // J. Comp. Chem. – 2020. – V. 41. – P. 2213–2222.

2. S.V. Baykov, S.I. Filimonov, A.V. Rozhkov, A.S. Novikov, **I.V. Ananyev**, D.M. Ivanov, V.Y. Kukushkin. Reverse sandwich structures from interplay between lone pair- π -hole atom-directed $C\cdots dz_2[M]$ and halogen bond interactions // *Cryst. Growth Des.* – 2020. – V. 20. – P. 995–1008.
3. I.Y. Chernyshov, **I.V. Ananyev**, E.A. Pidko. Revisiting van der Waals radii: from comprehensive structural analysis to knowledge-based classification of interatomic contacts // *Chemphyschem.* – 2020. – V. 21. – P. 370–376.
4. A.A. Larin, A.V. Shaferov, M.A. Epishina, I.N. Melnikov, N.V. Muravyev, **I.V. Ananyev**, L.L. Fershtat, N.N. Makhova. Pushing the energy-sensitivity balance with high-performance bifuroxans // *ACS Appl. Energy Mat.* – 2020. – V. 3. – P. 7764–7771.
5. A.V. Rozhkov, D.M. Ivanov, A.S. Novikov, **I.V. Ananyev**, N.A. Bokach, V.Y. Kukushkin. Metal-involving halogen bond $Ar-I\cdots[d_{z^2}Pt^{II}]$ in a platinum acetylacetonate complex // *CrystEngComm.* – 2020. – V. 22. – P. 554–563.
6. E.S. Zhilin, M.S. Polkovnichenko, **I.V. Ananyev**, L.L. Fershtat, N.N. Makhova. Novel arylazo-1,2,5-oxadiazole photoswitches: synthesis, photoisomerization and nitric oxide releasing properties // *ChemPhotoChem.* – 2020. – V. 4. – P. 5321.
7. A.A. Anisimov, **I.V. Ananyev**. Revisiting the energy treatment of the density of molecular crystals: an interrelation between intermolecular interaction energies and changes of molecular volume // *Russ. Chem. Bull.* – 2021. – V. 70. – P. 1429–1437.
8. D.A. Chaplygin, A.A. Larin, N.V. Muravyev, D.B. Meërov, E.K. Kosareva, V.G. Kiselev, A.N. Pivkina, **I.V. Ananyev**, L.L. Fershtat. Nitrogen-rich metal-free salts: a new look at the 5-(trinitromethyl)tetrazolate anion as an energetic moiety // *Dalton Trans.* – 2021. – V. 50. – P. 13778–13785.
9. O.K. Farat, **I.V. Ananyev**, A.L. Tatarets, S.A. Varenichenko, E.V. Zaliznaya, V.I. Markov. Influence of the amidine fragment on spectral properties of xanthene dyes // *J. Mol. Struct.* – 2021. – V. 1224. – P. 129191.
10. V.Y. Kotov, P.A. Buikin, A.B. Ilyukhin, A.A. Korlyukov, **I.V. Ananyev**, A.V. Gavrikov, M.G. Medvedev. Hybrid iodobismuthates code: adapting the geometry of Bi polyhedra to weak interactions // *Mendeleev Commun.* – 2021. – V. 31. – P. 166–169.
11. A.V. Rozhkov, **I.V. Ananyev**, A.A. Petrov, B. Galmés, A. Frontera, N.A. Bokach, V.Y. Kukushkin. Ligand Steric Hindrances Switch Bridging (μ_2 -I) $\cdots O_2O$ to two-center $I\cdots O$ halogen-bonding mode in the assembly of diketonate Copper(II) species // *Cryst. Growth Des.* – 2021. – V. 21. – P. 4073–4082.
12. E.K. Kosareva, R.V. Gainutdinov, A.A.L. Michalchuk, **I.V. Ananyev**, N.V. Muravyev. Mechanical stimulation of energetic materials at the nanoscale // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2022. – V. 24. – P. 8890–8900.

- 13.Y.V. Torubaeв, I.V. Skabitsky, A.A. Anisimov, **I.V. Ananyev**. Long-range supramolecular synthon polymorphism: a case study of two new polymorphic cocrystals of Ph₂Te₂-1,4-C₆F₄I₂ // CrystEngComm. – 2022. – V. 24. – P. 1442–1452.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.3 (МГУ.02.04)

к.х.н., доцент Шилина М.И.

