

Сведения об официальных оппонентах

диссертации Сызганцевой Марии Алексеевны

«Влияние модификации электронной структуры металл-органических каркасов на времена излучательной и безызлучательной электрон-дырочной рекомбинации»

Ф.И.О.: Витковская Надежда Моисеевна

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная(ые) специальность(и): 02.00.04 – физическая химия, 02.00.03 – органическая химия

Должность: Зав. лабораторией квантовой химии

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет», Лаборатория квантовой химии ИГУ

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

Телефон: +7-3952-52-12-11

E-mail: vita@cc.isu.ru

web-site: https://isu.ru/ru/university/structure/si/lab_kvant_himii

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4
—«Физическая химия» за последние 5 лет:

- 1 Bidusenko I.A., Schmidt E.Yu., Ushakov I.A., Vashchenko A.V., Protsuk N.I., Orel V.B., **Vitkovskaya N.M.**, and Trofimov B.A. / Semistabilized Diazatrienyl Anions from Pyridine Imines and Acetylenes: An Access to (Z)-Stilbene/Imidazopyridine Ensembles, Benzyl Imidazopyridines, and Beyond // J. Org. Chem - **2022** - V.87, N.18, P. 12225-12239 - DOI: 10.1021/acs.joc.2c01372
- 2 Orel V.B., **Vitkovskaya N.M.**, Bobkov A.S., Semenova N.V., Schmidt E.Y., Trofimov B.A. / Aldol Condensation Versus Superbase-Catalyzed Addition

of Ketones to Acetylenes: A Quantum-Chemical and Experimental Study // J. Org. Chem. - **2021** - V.86, N. 11, p.7439-7449 - DOI: 10.1021/acs.joc.1c00388

3 Absalyamov D.Z., **Vitkovskaya N.M.** / Quantum-chemical description of interactions in the PhNH₂/HCCH system in a superbasic medium // J. Phys.: Conf. Ser. - **2021** - V.1847, N. 1 - DOI: 10.1088/1742-6596/1847/1/012049

4 Absalyamov D.Z., **Vitkovskaya N.M.** / Quantum-chemical description of interactions in the PhNH₂/HCCH system in a superbasic medium // J. Phys.: Conf. Ser. - **2021** - V.1847, N. 1 - DOI: 10.1088/1742-6596/1847/1/012049

5 **N.M. Vitkovskaya**, V.B. Orel, V.B. Kobychiev, A.S. Bobkov, D.Z. Absalyamov, B.A. Trofimov / Quantum-chemical models of KOH(KOBut)/DMSO superbasic systems and mechanisms of base-promoted acetylene reactions // Int. J. Quantum Chem. – **2020** – V.120, N. 9 – P. e26152 (1-12) - DOI: 10.1002/qua.26158

6 **N.M. Vitkovskaya**, V.B. Orel, D.Z. Absalyamov, B.A. Trofimov / Self-Assembly of N-Phenyl-2,5-dimethylpyrrole from Acetylene and Aniline in KOH/DMSO and KOBut/DMSO Superbase Systems: A Quantum-Chemical Insight // J. Org. Chem. – **2020** – V.85, N.16 – P. 10617–10627 - DOI: 10.1021/acs.joc.0c01185

7 A.S. Bobkov, **N.M. Vitkovskaya**, B.A. Trofimov / Cascade Assembly of 4,5,6,7-Tetrahydroindole from Cyclohexanone Oxime and Acetylene in the KOH/DMSO Superbase Medium: A Quantum Chemical Study // J. Org. Chem. – **2020** – V.85, N.10 – P. 6463–6470 - DOI: 10.1021/acs.joc.0c00353

8 **N.M. Vitkovskaya**, A.S. Bobkov, S.V. Kuznetsova, V.S. Shcherbakova, A.V. Ivanov / Base-promoted formation of an annelated pyrrolo-1,4-oxazine ensemble from 1H-pyrrol-2-ylmethanol and propargyl chloride: a theoretical and experimental study // ChemPlusChem - **2019** doi: 10.1002/cplu.201900407

9 V.B. Orel, **N.M. Vitkovskaya**, D.Z. Absalyamov, E.Yu. Schmidt, B.A. Trofimov / Quantum chemical comparison of ethynylation and C-vinylation routes in superbase catalyzed reaction of acetylenes with imines // Mendelev Communications – **2019** - V. 29 - P. 622–624 doi: 10.1016/j.mencom.2019.11.005

Ф.И.О.: Исаева Вера Ильинична

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: без звания

Научная(ые) специальность(и): 1.4.4 - Физическая химия

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН), Лаборатория разработки и исследования полифункциональных катализаторов № 14

Адрес места работы: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

Телефон: +7

E-mail: v

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 —
«Физическая химия» за последние 5 лет:

1. Tarasov A.L., **Isaeva V.I.**, Tkachenko O.P., Chernyshev V.V., Kustov L.M. Conversion of CO₂ into liquid hydrocarbons in the presence of a Co-containing catalyst based on the microporous metal-organic framework MIL-53(Al). // Fuel Processing Technology, **2018**.- Vol. 176. - P. 101-106. DOI: 10.1016/j.fuproc.2018.03.016.
2. **Isaeva V.I.**, Eliseev O.L., Kazantsev R.V., Chernyshev V.V., Tarasov A.L., Davydov P.E., Lapidus A.L., Kustov L.M. Effect of the support morphology on the performance of Co nanoparticles deposited on metal-organic framework MIL-53(Al) in Fischer-Tropsch synthesis. // Polyhedron, **2019**. - Vol. 157 - P. 389-395. DOI: 10.1016/j.poly.2018.10.001.
3. **Isaeva V.I.**, Eliseev O.L., Chernyshev V.V., Bondarenko T.N., Vergun V.V., Kapustin G.I., Lapidus A.L., Kustov L.M. Palladium nanoparticles embedded in MOF matrices: catalytic activity and structural stability in iodobenzene methoxycarbonylation. // Polyhedron, **2019**. - Vol. 158. - P. 55-64. DOI: 10.1016/j.poly.2018.10.065.

4. **Isaeva V.I.**, Timofeeva M.N., Panchenko V.N., Lukoyanov I.A., Chernyshev V.V., Kapustin G.I., Davshan N.A., Kustov L.M. Design of novel catalysts for synthesis of 1,5-benzodiazepines from 1,2-phenylenediamine and ketones: NH₂-MIL-101(Al) as integrated structural scaffold for catalytic materials based on calix[4]arenes. // *Journal of Catalysis*, **2019**. - Vol. 369. - P. 60-71. DOI: 10.1016/j.jcat.2018.10.035.
5. Timofeeva M.N., Paukshtis E.A., Panchenko V.N., Shefer K.I., **Isaeva V.I.**, Kustov L.M., Gerasimov E.Yu. Tuning the catalytic performance of the novel composites based on ZIF-8 and Nafen through dimensional and concentration effects in the synthesis of propylene glycol methyl ether. // *European Journal of Organic Chemistry*, **2019**. - Vol. 26. - P. 4215-4225. DOI: 10.1002/ejoc.201900354.
6. **Isaeva V.I.**, Vedenyapina M.D., Kulaishin S.A., Lobova A.A., Chernyshev V.V., Kapustin G.I., Tkachenko O.P., Vergun V.V., Arkhipov D.A., Nissenbaum V.D., Kustov L.M. Adsorption of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid in an aqueous medium on nanoscale MIL-53(Al) type materials. // *Dalton Transactions*, **2019**. - Vol. 48. - P. 15091-15104. DOI: 10.1039/C9DT03037A.
7. **Isaeva V.I.**, Chernyshev V.V., Fomkin A.A., Shkolin A.V., Veselovsky V.V., Kapustin G.I., Sokolova N.A., Kustov L.M. Preparation of novel hybrid catalyst with an hierarchical micro-/mesoporous structure by direct growth of the HKUST-1 nanoparticles inside Mesoporous Silica Matrix (MMS). // *Microporous & Mesoporous Materials*, **2020**. - Vol. 300. - No. 110136. DOI: 10.1016/j.micromeso.2020.110136.
8. **Isaeva V.I.**, Saifutdinov B.R., Chernyshev V.V., Vergun V.V., Kapustin G.I., Kurnysheva Y.P., Ilyin M.M., Kustov L.M. Impact of the Preparation Procedure on the Performance of the Microporous HKUST-1 Metal-Organic Framework in the Liquid-Phase Separation of Aromatic Compounds. // *Molecules*, **2020**. - Vol. 25. - P. 2648. DOI: 10.3390/molecules25112648.
9. **Isaeva V.I.**, Papathanasiou K., Kustov L.M. Zeolite-like boron imidazolate frameworks (BIFs): synthesis and application: Mini-review. // *Crystals*, **2020**. - Vol. 10. - P. 617. DOI: 10.3390/cryst10070617.
10. Kudelin A.I., Papathanasiou K., **Isaeva V.**, Caro J., Salmi T., Kustov L.M. Microwave-Assisted Synthesis Characterization and Modeling of CPO-27-Mg Metal-Organic Framework for Drug Delivery. // *Molecules*, **2021**. - Vol. 26. - P. 426. DOI: 10.3390/molecules26020426.

11. **Isaeva V.I.**, Vedenyapina M.D., Kurmysheva A. Yu., Weichgrebe D., Nair R.R., Nguyen N.P.T., Kustov L.M. Modern Carbon-Based Materials for Adsorptive Removal of Organic and Inorganic Pollutants from Water and Wastewater. // *Molecules*, **2021**. – Vol. 26. – P. 6628. DOI: 10.3390/molecules26216628.
12. **V. I. Isaeva**, K Papathanasiou, V. V. Chernyshev, L. Glukhov, G. Deyko, K. K. Bisht, O. P. Tkachenko, S. V. Savilov, N. A. Davshan, L. M. Kustov. Hydroamination of Phenylacetylene with Aniline over Gold Nanoparticles Embedded in the Boron Imidazolate Framework BIF-66 and Zeolitic Imidazolate Framework ZIF-67. // *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2021**. - Vol. 13. – P. 59803-59819. DOI: 10.1021/acsami.1c14359.
13. B. R. Saifutdinov, **V. I. Isaeva**, V. V. Chernyshev, V. V. Vergun, G. I. Kapustin, Y. P. Ivanova, M. M. Ilyin, O. P. Tkachenko, A. K. Buryak, L. M. Kustov. Understanding the Working Mechanism of the Novel HKUST-1@BPS Composite Materials as Stationary Phases for Liquid Chromatography. // *Polymers*, **2022**. – Vol. 14. – P. 1373. DOI: 10.3390/polym14071373.
14. Y. Wu, Y. Li, T. Zhao, X. Wang, **V. I. Isaeva**, L. M. Kustov, J. Yao, J. Gao. Bimetal-organic framework-derived nanotube@cellulose aerogels for peroxymonosulfate (PMS) activation. // *Carbohydrate Polymers*, **2022**. – Vol. 296.–No 119969. DOI: 10.1016/j.carbpol.2022.
15. **V. I. Isaeva**, M. N. Timofeeva, I. A. Lukoyanov, E. Yu. Gerasimov, V. N. Panchenko, V. V. Chernyshev, L. M. Glukhov, L. M. Kustov. Novel MOF catalysts based on calix[4]arene for the synthesis of propylene carbonate from propylene oxide and CO₂. // *Journal of CO₂ Utilization*, **2022**. – Vol. 66 - No 102262. DOI: 10.1016/j.jcou.2022.102262.

Ф.И.О.: Колесников Сергей Владимирович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: доцент

Научная(ые) специальность(и): 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Должность: доцент

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» физический факультет, отделение экспериментальной и теоретической физики, кафедра общей физики

Адрес места работы: 119991, г. Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр. 2

Телефон: +7

E-mail: kolesnikov@physics.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 —
«Физическая химия» за последние 5 лет:

1. **Kolesnikov S. V.**, Kolesnikova I. N., Improved kinetic Monte Carlo models for computational and analytical investigations of the magnetic properties of finite-size atomic chains // Europhysics Letters. — **2022**. — Vol. 137, № 5. — P. 56003.
2. Dokukin S. A., **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Study of Pt–Cu nanocontact formation processes during the indentation of a scanning tunneling microscope tip into a Pt/Cu surface alloy by computer simulations // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — **2021**. — Vol. 133, № 3. — P. 360–365.
3. Dokukin S. A., **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Formation of Cu–Pt nanocontacts in stm breaking junction simulations: MD simulations and one-dimensional diffusion model // The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems. — **2021**. — Vol. 94, № 4. — P. 85.
4. Сыромятников А. Г., **Колесников С. В.**, Салецкий А. М., Клавсюк А. Л., Формирование и свойства металлических атомных цепочек и проводов // Успехи физических наук. — **2021**. — том 191, № 3. — с. 426-433.
5. Dokukin S. A., **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Molecular dynamics simulation of the formation of Cu–Pt nanocontacts in the mechanically controlled

break junction experiments // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2020. — Vol. 22, № 28. — P. 16136–16142.

6. Dokukin S. A., **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Molecular dynamics simulation of elongation of copper-platinum nanocontacts // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2020. — Vol. 131, no. 5. — P. 745–751.

7. **Kolesnikov S. V.**, Kolesnikova I. N., Magnetic properties of the finite-length biatomic chains in the framework of the single domain-wall approximation // Physical Review B. — 2019. — Vol. 100, № 22. — P. 224424.

8. Dokukin S. A., **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Klavsyuk A. L., Growth of the Pt/Cu(111) surface alloy: Self-learning kinetic Monte Carlo simulations // Journal of Alloys and Compounds. — 2018. — Vol. 763. — P. 719–727.

9. **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Dokukin S. A., Klavsyuk A. L., Kinetic Monte Carlo method: Mathematical foundations and applications for physics of low-dimensional nanostructures // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2018. — Vol. 10, № 5. — P. 564–587.

10. Dokukin S. A., **Kolesnikov S. V.**, Saletsky A. M., Efficient energy basin finding method for atomistic kinetic Monte Carlo models // Computational Materials Science. — 2018. — Vol. 155. — P. 209–215.

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

к.х.н., доцент Шилина М.И.

