

**Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Ананьева Ивана Вячеславовича**

«Устойчивость молекул, супрамолекулярных ассоциатов и кристаллов и прочность межатомных взаимодействий в теории "Атомы в Молекулах"»

1. Ф.И.О.: Цирельсон Владимир Григорьевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: 01.04.17 Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва

Должность: заведующий кафедрой

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», Кафедра квантовой химии

Адрес места работы: 125047, Россия, г. Москва, Миусская площадь, д. 9

Тел.: +7 (499) 978-95-84

E-mail: tsirelson.v.g@muctr.ru

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

1. Shteingolts S.A., Stash A.I., Tsirelson V.G., Fayzullin R.R. Real - Space Interpretation of Interatomic Charge Transfer and Electron Exchange Effects by Combining Static and Kinetic Potentials and Associated Vector Fields** // Chemistry – A European Journal. 2022. Vol. 28, № 48.
2. Stash A.I., Tsirelson V.G. *WinXPRO*, *3DPlot* and *TrajPlot* computer software: new options for orbital-free quantum crystallography studies // J Appl Crystallogr. 2022. Vol. 55, № 2. P. 420–424.
3. Bartashevich E. V., Levina E.O., Yushina I.D., Sozykin S.A., Tsirelson V.G. Electron delocalization in defect-containing graphene and its influence on tetrel bond formation // Physical Chemistry Chemical Physics. 2023. Vol. 25, № 36. P. 24342–24354.
4. Levina E.O., Tsirelson V.G. <sc>DFT</sc> potentials from a chemical perspective: Anatomy of electron (de)localization in molecules and crystals // J Comput Chem. 2023. Vol. 44, № 22. P. 1817–1835.
5. Matveychuk Y. V., Sobalev S.A., Borisova P.I., Bartashevich E. V., Tsirelson V.G. Negative Linear Compressibility of Formate Crystals from the Viewpoint of Quantum Electronic Pressure // Crystals (Basel). 2023. Vol. 13, № 7. P. 1147.

2. Ф.И.О.: Эварестов Роберт Александрович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: 01.04.02 Теоретическая и математическая физика

Должность: заведующий кафедрой

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский Государственный Университет», Институт химии, Кафедра квантовой химии

Адрес места работы: 198504, Россия, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., 26

Тел.: +7 (812) 428-67-55

E-mail: r.evarestov@spbu.ru

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

1. Kovalenko A. V., Bandura A. V., Kuruch D.D., Lukyanov S.I., Evarestov R.A. The Nature of Chemical Bonds in the Tetragonal Polymorph of InTe: First - Principles - Based Topological Analysis // *physica status solidi (b)*. 2021. Vol. 258, № 8.
2. Evarestov R.A., Panin A.I., Tverjanovich Y.S. Argentophillic interactions in argentum chalcogenides: First principles calculations and topological analysis of electron density // *J Comput Chem*. 2021. Vol. 42, № 4. P. 242–247.
3. Evarestov R.A., Kuzmin A. Topological analysis of chemical bonding in the layered FePSe_3 upon pressure - induced phase transitions // *J Comput Chem*. 2020. Vol. 41, № 31. P. 2610–2623.
4. Ivanov D.M., Baykov S. V., Novikov A.S., Romanenko G., Bokach N.A., Evarestov R.A., Kukushkin V.Yu. Noncovalent Sulfoxide–Nitrile Coupling Involving Four-Center Heteroleptic Dipole–Dipole Interactions between the Sulfinyl and Nitrile Groups // *Cryst Growth Des*. 2020. Vol. 20, № 5. P. 3417–3428.
5. Kisel K.S., Shakirova J.R., Pavlovskiy V. V., Evarestov R.A., Gurzhiy V. V., Tunik S.P. Unusual Effects of the Metal Center Coordination Mode on the Photophysical Behavior of the Rhenium(I) and Rhenium(I)–Iridium(III) Complexes // *Inorg Chem*. 2023. Vol. 62, № 45. P. 18625–18640.

3. Ф.И.О.: Оганов Артем Ромаевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без ученого звания, профессор РАН

Научная специальность: 25.00.05 Минералогия, кристаллография

Должность: руководитель лабораторией

Место работы: Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», Лаборатория Дизайна Материалов

Адрес места работы: 121205, Россия, г. Москва, Территория Инновационного Центра «Сколково», Большой бульвар д.30, стр.1

Тел.: +7 (495) 280-14-81

E-mail: a.oganov@skoltech.ru

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

1. Momenzadeh Abardeh Z., Salimi A., Oganov A.R. Crystal structure prediction of *N*-halide phthalimide compounds: halogen bonding synthons as a touchstone // CrystEngComm. 2022. Vol. 24, № 34. P. 6066–6075.
2. Dong X., Oganov A.R., Cui H., Zhou X.-F., Wang H.-T. Electronegativity and chemical hardness of elements under pressure // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2022. Vol. 119, № 10.
3. Lepeshkin S. V., Baturin V.S., Naumova A.S., Oganov A.R. “Magic” Molecules and a New Look at Chemical Diversity of Hydrocarbons // J Phys Chem Lett. 2022. Vol. 13, № 32. P. 7600–7606.
4. Marchenko E.I., Oganov A.R., Mazhnik E.A., Eremin N.N. Stable compounds in the CaO-Al₂O₃ system at high pressures // Phys Chem Miner. 2022. Vol. 49, № 11. P. 44.
5. Anisimov V.I., Oganov A.R., Mazannikova M.A., Novoselov D.Y., Korotin Dm.M. Formal Valence, Charge Distribution, and Chemical Bond in a Compound with a High Oxidation State: KMnO₄ // JETP Lett. 2023. Vol. 117, № 5. P. 377–383.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.3,
К.х.н., доцент М.И. Шилина

Подпись, печать