

**Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Рукина Павла Сергеевича
«Теоретическое моделирование влияния внутри- и межмолекулярных
взаимодействий на спектральные свойства красителей,
используемых в оптических хемосенсорах»**

1. 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: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики РАН, Лаборатория теории элементарных процессов

Адрес места работы: 142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка, проспект ак. Семенова, 1.

Тел.: +7 (495) 993-57-07

E-mail: medvedev@icp.ac.ru

Список основных научных публикаций по специальности 02.00.04 – физическая химия за последние 5 лет:

1. **Medvedev E. S.**, Ushakov V. G. High sensitivity of the anomalies in the rotational and ro-vibrational bands of carbon monoxide to small changes in the molecular potential and dipole moment // Journal of Molecular Spectroscopy. — 2018. — V. 349. — P. 60–63.
2. **Medvedev E. S.**, Ushakov V. G., Stolyarov A. V., et al. Intensity anomalies in the rotational and ro-vibrational spectra of diatomic molecules // Journal Of Chemical Physics. — 2017. — V. 147. — Issue 16. — P. 164309.
3. **Medvedev E. S.**, Meshkov V. V., Stolyarov A. V., et al. Impact of the dipole-moment representation on the intensity of high overtones // Journal of molecular spectroscopy. — 2016. — V. 330. — Issue SI. — P. 36–42.
4. **Medvedev E. S.**, Meshkov V. V., Stolyarov A. V., et al. // Peculiarities of high-overtone transition probabilities in carbon monoxide revealed by high-precision calculation // Journal of chemical physics. — 2015. — V. 143. — Issue 15. — P. 154301.
5. **Medvedev E. S.**, Stuchebrukhov A. A. Mechanisms of generation of local Delta pH in mitochondria and bacteria // Biochemistry-Moscow. — 2014. — V. 79. — Issue 5. — P. 425–434.

2. Ф.И.О.: Никитенко Владимир Роленович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: -

Научная специальность: 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Должность: профессор

Место работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ» кафедра физики конденсированных сред

Адрес места работы: 115409, г. Москва. Каширское шоссе, д. 31

Тел.: +7(495) 788-56-99 доб. 8092

E-mail: vrnikitenko@mephi.ru

Список основных научных публикаций по специальности 02.00.04 – физическая химия за последние 5 лет:

1. Korolev N. A., **Nikitenko V. R.** Initial transient photocurrent as a result of polarization of geminate pairs in organics with donor–acceptor bulk heterojunction // Chemical Physics. — 2017. — V. 491. — P. 69–73.
2. **Nikitenko V. R.**, Saunina A. Yu., Tyutnev A. P., et al. Analytic Modeling of Field Dependence of Charge Mobility and Applicability of the Concept of the Effective Transport Level to an Organic Dipole Glass // Journal Of Physical Chemistry C. — 2017. — V. 121. — Issue 14. — P. 7776–7781.
3. Chistyakov A. A., Zvaigzne M. A., **Nikitenko V. R.**, et al. Optoelectronic Properties of Semiconductor Quantum Dot Solids for Photovoltaic Applications // Journal Of Physical Chemistry Letters. — 2017. — V. 8. — Issue 17. — P. 4129–4139.
4. Korolev N. A., **Nikitenko V. R.** Simulation of the Polarization Current of Geminate Pairs in an Organic Material with Gaussian Disorder // Semiconductors. — 2015. — V. 49. — Issue 12. — P. 1645–1650.
5. **Nikitenko V. R.**, Strikhanov M. N. Transport level in disordered organics: An analytic model and Monte–Carlo simulations // Journal Of Applied Physics. — 2014. — V. 115. — Issue 7. — P. 073704.

3. Ф.И.О.: Григорьев Федор Васильевич

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: -

Научная специальность: 02.00.04 - физическая химия

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, 4.05. Лаборатория вычислительных систем и прикладных технологий программирования

Адрес места работы: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 4, НИВЦ МГУ

Тел.: +7 916 155-67-94

E-mail: fedor.grigoriev@gmail.com

Список основных научных публикаций по специальности 02.00.04 – физическая химия за последние 5 лет:

1. **Grigoriev, F.**, Sulimov, V. & Tikhonravov, A. Simulation of the optical coating deposition // Advanced Optical Technologies. — 2018. — V. 7. Issue 1-2. — P. 13-22.
2. **Grigoriev F.**, Sulimov A., Kochikov I., et al. Computational experiments on atomistic modeling of thin-film deposition // Applied Optics. — 2017. — V. 56. — Issue 4. — P. C87–C90.
3. **Grigoriev F. V.**, Sulimov V. B. Simple combined explicit/implicit water model // Molecular Simulation. — 2016. — V. 42. — Issue 18. — P. 1528–1534.
4. Grigoriev F. V., Katkova E. V., Sulimov A. V., et al. Annealing of deposited SiO₂ thin films: full-atomistic simulation results // Optical Materials Express. — 2016. — V. 6. — Issue 12. — P. 3960–3966.
5. **Grigoriev F. V.**, Sulimov A. V., Kochikov I. V., et al. High-performance atomistic modeling of optical thin films deposited by energetic processes // International Journal Of High Performance Computing Applications. — 2015. — V. 29. — Issue 2. — P. 184–192.
6. **Grigoriev F. V.** Force Fields for Molecular Dynamics Simulation of the Deposition of a Silicon Dioxide Film // Moscow University Physics Bulletin. — 2015. — V. 70. — Issue 6. — P. 521–526.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ 02.02,
Н.Н. Матушкина

