

Сведения о научном руководите диссертации
Клешиной Надежды Николаевны
«Моделирование состояний матрично-изолированных атомов и их
спектральных характеристик»

Научный руководитель: Бучаченко Алексей Анатольевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без звания

Научная специальность: 02.00.17 - Математическая и квантовая химия

Должность: профессор

Место работы: автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», центр науки и технологии в энергетике

Адрес места работы: 143026, Москва, Московская обл., Большой бул., 30

Тел.: +7 (495) 280 14 81 доб. 3119

E-mail: A.Buchachenko@skoltech.ru

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

1. Tarakanova A.S., Buchachenko A.A., Bezrukov D.S. Trapping sites of Li atom in the rare gas crystals Ar, Kr, and Xe: Analysis of stability and manifestation in the EPR spectra // Low Temperature Physics. – 2020. – Vol. 46. – P. 165-172.
2. Bezrukov D.S., Kleshchina N.N., Kalinina I.S., Buchachenko A.A. Ab initio interaction potentials of the Ba, Ba⁺ complexes with Ar, Kr, and Xe in the lowest excited states // J. Chem. Phys. – 2019. – Vol. 150. – P. 064314.
3. Ozerov G. K., Bezrukov D. S., Buchachenko A. A. Accommodation of a dimer in an Ar-like lattice: exploring the generic structural motifs // Royal Society of Chemistry. – 2019. – Vol. 21. – P. 16549-16563.
4. Ozerov G. K., Bezrukov D. S., Buchachenko A. A. Computational study of the stable atomic trapping sites in Ar lattice // Low Temperature Physics. – 2019. – Vol. 45. – P. 301-309.
5. Bezrukov D.S., Kleshchina N.N., Kalinina I.S., Buchachenko A.A. Empirically Modified Potentials of Interaction between Rare Gases for Matrix Isolation Problems // Russian J. Phys. Chem. A – 2019. – Vol. 93. – P. 1505-1512.

6. Kleshchina N.N., Kalinina I.S., Leibin I.V., Bezrukov D.S., Buchachenko A.A. Stable axially symmetric atomic impurity in an fcc solid-Ba in rare gases // J. Chem. Phys. – 2019. – Vol. 151. – P. 121104.
7. Kleshchina N.N., Kalinina I.S., Lambo R., Buchachenko A.A., Bezrukov D.S., S-M Hu. Triplet emission of atomic ytterbium isolated in a xenon matrix // Low Temperature Physics. – 2019. – Vol. 45. – P. 707-714.
8. Buchachenko Alexei A., Viehland Larry A. Interaction potentials and transport properties of Ba, Ba⁺, and Ba²⁺ in rare gases from He to Xe // J. Chem. Phys. – 2018. – Vol. 148. – P. 154304.
9. Kleshchina N.N., Korchagina K.A., Bezrukov D.S., Buchachenko A.A. Modeling of manganese atom and dimer isolated in solid rare gases: Structure, stability, and effect on spin coupling // J. Phys. Chem. A. – 2017. – Vol. 121. – P. 2429-2441.
10. Morita M., Klos J., Buchachenko A.A., Tscherbul T.V. Cold collisions of heavy (2)Sigma molecules with alkali-metal atoms in a magnetic field: Ab initio analysis and prospects for sympathetic cooling of SrOH((2)Sigma(+)) by Li(S-2) // American Physical Society. – 2017. – Vol. 95. – P. 063421.
11. Borkowski M., Buchachenko A.A., Ciuryło R., Julienne P.S., Hirota Y., Kikuchi Y., Takahashi K., Takasu Y., Takahashi Y. Beyond-Born-Oppenheimer effects in sub-kHz-precision photoassociation spectroscopy of ytterbium atoms // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. – 2017. – Vol. 96. – P. 063405.
12. Tscherbul T.V., Brumer P., Buchachenko A.A. Spin-orbit interactions and quantum spin dynamics in cold ion-atom collisions // Phys. Rev. Lett. – 2016. – Vol. 114 – P. 143201.
13. Tao L.G., Kleshchina N.N., Lambo R., Buchachenko A.A., Zhou X.G., Bezrukov D.S., Hu S.M. Heat- and light-induced transformations of Yb trapping sites in an Ar matrix // J. Chem. Phys. – 2015. – Vol. 143. – P. 174306.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.02.04.,
к.х.н. Шилина М.И.

