

Сведения о научном руководителе

диссертации Медведева Михаила Геннадьевича

«Достоверность результатов квантовохимических расчётов методами теории функционала плотности»

Научный руководитель: Лысенко Константин Александрович

Ученая степень: доктор химических наук (02.00.04- физическая химия)

Ученое звание: профессор РАН

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Институт элементоорганических соединений российской академии наук им. А.Н. Несмеянова, Лаборатория рентгеноструктурных исследований.

Адрес места работы: г. Москва ул. Вавилова д.28

Тел: 8 (916) 475 65 35

Email: kostya@incos.ac.ru

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

1. Roitershtein D.M., Puntus L.N., Vinogradov A.A., Lyssenko K.A., Minyaev M.E., Dobrokhodov M.D., Taidakov I.V., Varaksina E.A., Churakov A.V., Nifant'ev I.E., *Polyphenylcyclopentadienyl Ligands as an Effective Light-Harvesting π -Bonded Antenna for Lanthanide+ 3 Ions*, Inorg. Chem., 2018, 57 (16), 10199–10213.
2. Romanova A, Lyssenko K., Ananyev I, *Estimations of energy of noncovalent bonding from integrals over interatomic zero-flux surfaces: Correlation trends and beyond*, J. Comput. Chem. 2018, 39, 1607–1616.
3. Ananyev I.V., Karnoukhova V.A, Dmitrienko A.O., Lyssenko K.A, *Toward a Rigorous Definition of a Strength of Any Interaction Between Bader's Atomic Basins*, J. Phys. Chem. A, 2017, 121, 23, 4517–4522
4. Medvedev M.G., Bushmarinov I.S., Sun J., Perdew J.P., Lyssenko K.A. *Density functional theory is straying from the path toward the exact functional*, Science. 2017. 355, 6320. 49–52.
5. Medvedev M.G., Bushmarinov I.S., Lyssenko K.A. *Z-effect reversal in carboxylic acid associates*, Chem. Comm. 2016. 52, 39. 6593–6596.

Научный руководитель

Лысенко К.А.

Ученый секретарь ИНЭОС РАН

Гулакова Е.Н.

