

**Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Медведева Михаила Геннадьевича
«Достоверность результатов квантовохимических расчётов методами
теории функционала плотности»**

1. Ф.И.О.: Оганов Артём Ромаевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: 25.00.05 – минералогия, кристаллография (физ.-мат. науки)

Должность: заведующий лабораторией

Место работы: Сколковский Институт Науки и Технологий (Сколтех),
Лаборатория дизайна материалов

Адрес места работы: 143026, г. Москва, Территория Инновационного
Центра «Сколково», ул. Нобеля, д.3

Тел.: +7 (495) 408-45-54

E-mail: a.oganov@skoltech.ru

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

1. Núñez-Valdez M., Allahyari Z., Fan T., **Oganov A.R.** Efficient technique for computational design of thermoelectric materials // Computer Physics Communications. – 2018. – Vol. 222. – P. 152–157.
2. Shtukenberg A.G., Zhu Q., Carter D.J., Vogt L., Hoja J., Schneider E., Song H., Pokroy B., Polishchuk I., Tkatchenko A., **Oganov A.R.**, Rohl A.L., Tuckerman M.E., Kahr B. Powder diffraction and crystal structure prediction identify four new coumarin polymorphs // Chemical Science. – 2017. – Vol. 8, № 7. – P. 4926–4940.
3. Dong X., **Oganov A.R.**, Goncharov A.F., Stavrou E., Lobanov S., Saleh G., Qian G.-R., Zhu Q., Gatti C., Deringer V.L., Dronskowski R., Zhou X.-F., Prakapenka V.B., Konôpková Z., Popov I.A., Boldyrev A.I., Wang H.-T. A stable compound of helium and sodium at high pressure // Nature Chemistry. – 2017. – Vol. 9, № 5. – P. 440–445.
4. Yu X., **Oganov A.R.**, Popov I.A., Boldyrev A.I. d-AO spherical aromaticity in Ce₆O₈ // Journal of Computational Chemistry. – 2016. – Vol. 37, № 1. – P. 103–109.
5. Wang Q., German K.E., **Oganov A.R.**, Dong H., Feya O.D., Zubavichus Y.V., Murzin V.Y. Explaining stability of transition metal carbides – and why TcC does not exist // RSC Advances. – 2016. – Vol. 6, № 20. – P. 16197–16202.

2. Ф.И.О.: Тарасов Юрий Игоревич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: —

Научная специальность: 02.00.04 - Физическая химия (физ.-мат. науки)

Должность: заведующий кафедрой

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Российский технологический университет МИРЭА, Институт тонких химических технологий, кафедра физики и технической механики

Адрес места работы: 119435, г. Москва, ул. Малая Пироговская, дом 1; стр. 5 (корпус А)

Тел.: +7 (495) 246-05-55

E-mail: Y.I.Tarasov@mitht.org

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

1. **Tarasov Y.I.**, Kochikov I.V. Pseudo-conformer models for linear molecules: Joint treatment of spectroscopic, electron diffraction and ab initio data for the C3O2 molecule // Journal of Molecular Structure. – 2018. – Vol. 1162. – P. 117–124.
2. **Tarasov Y.I.**, Kochikov I.V., Kovtun D.M., Polenov E.A., Ivanov A.A. Internal rotation and equilibrium structure of the 2-methyl-2-nitropropane molecule from joint processing of gas phase electron diffraction data, vibrational and microwave spectroscopy data, and quantum chemical calculation results // Journal of Structural Chemistry. – 2017. – Vol. 58, № 3. – P. 498–507.
3. Kochikov I.V., Kovtun D.M., **Tarasov Y.I.** Electron diffraction analysis for the molecules with degenerate large amplitude motions: Intramolecular dynamics in arsenic pentafluoride // Journal of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1132. – P. 139–148.
4. Kovtun D.M., Kochikov I.V., **Tarasov Y.I.** Internal rotation and equilibrium structure of 2-chloro-3-nitrothiophene from gas electron diffraction and quantum chemistry // Journal of Molecular Structure. – 2015. – Vol. 1100. – P. 311–317.
5. Kovtun D.M., Kochikov I.V., **Tarasov Y.I.** Electron Diffraction Analysis for the Molecules with Multiple Large-Amplitude Motions. 3-Nitrostyrene—A Molecule with Two Internal Rotors // The Journal of Physical Chemistry A. – 2015. – Vol. 119, № 9. – P. 1657–1665.

3. Ф.И.О.: Нечаев Михаил Сергеевич

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: —

Научная специальность: 02.00.08 — химия элементоорганических соединений (хим. науки)

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Кафедра органической химии

Адрес места работы: 119234, г. Москва, Ленинские Горы, д.1, стр.3

Тел.: +7 (495) 408-45-54

E-mail: m.s.nechaev@org.chem.msu.ru

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

1. Fetisov E.O., Gloriozov I.P., **Nechaev M.S.**, Kahlal S., Saillard J.-Y., Oprunenko Y.F. Thermally induced inter-ring haptotropic rearrangements in π -complexes of molybdenum with nitrogen containing polyaromatic heterocycles: A DFT study // Journal of Organometallic Chemistry. – 2017. – Vol. 830. – P. 212–218.
2. Chesnokov G.A., Topchiy M.A., Dzhevakov P.B., Griбанov P.S., Tukov A.A., Khrustalev V.N., Asachenko A.F., **Nechaev M.S.** Eight-membered-ring diaminocarbenes bearing naphthalene moiety in the backbone: DFT studies, synthesis of amidinium salts, generation of free carbene, metal complexes, and solvent-free copper catalyzed azide–alkyne cycloaddition (CuAAC) reaction // Dalton Transactions. – 2017. – Vol. 46, № 13. – P. 4331–4345.
3. Sinditskii V.P., Filatov S.A., Kolesov V.I., Kapranov K.O., Asachenko A.F., **Nechaev M.S.**, Lunin V.V., Shishov N.I. Combustion behavior and physico-chemical properties of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50) // Thermochemica Acta. – 2015. – Vol. 614. – P. 85–92.
4. Fetisov E.O., Gloriozov I.P., Kissounko D.A., **Nechaev M.S.**, Kahlal S., Saillard J.-Y., Oprunenko Y.F. DFT study of dihydrogen addition to molybdenum π -heteroaromatic complexes: a prerequisite step for the catalytic hydrodenitrogenation process // New Journal of Chemistry. – 2015. – Vol. 39, № 11. – P. 8915–8921.
5. Morozov O.S., Lunchev A.V., Bush A.A., Tukov A.A., Asachenko A.F., Khrustalev V.N., Zaleskiy S.S., Ananikov V.P., **Nechaev M.S.** Expanded-Ring N -Heterocyclic Carbenes Efficiently Stabilize Gold(I) Cations, Leading to High Activity in π -Acid-Catalyzed Cyclizations // Chemistry - A European Journal. – 2014. – Vol. 20, № 20. – P. 6162–6170.

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

