

**Сведения об официальных оппонентах
по диссертации Клещиной Надежды Николаевны
«Моделирование состояний матрично-изолированных атомов и их
спектральных характеристик»**

ФИО: Дмитриев Юрий Анатольевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: старший научный сотрудник

Научная специальность: 01.04.04 — физическая электроника

Должность: старший научный сотрудник

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
Отделение физики плазмы, атомной физики и астрофизики, лаборатория
Атомной радиоспектроскопии

Адрес места работы: 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26

Тел.: +7(812)292-73-15

E-mail: dmitriev.mares@mail.ioffe.ru

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

1. Dmitriev Y.A., Benetis N.P. Anisotropic rotation dynamics of the CH_3 radical impurity in solid Ar by tracking the low temperature motionally averaged static EPR parameters // J. Mol. Struct. – 2020. – Vol. 1205. – P. 127628.
2. Dmitriev Y.A., Benetis N.P. Trapping mechanism and sites of H and D atoms in solid Ne // ФНТ. – 2019. – Vol. 45. – P. 774-788.
3. Benetis N.P., Zelenetckii I.A., Dmitriev, Y.A. Low-temperature tunneling of CH_3 quantum rotor in van der Waals solids // ФНТ. – 2019. – Vol. 45. – P. 495-510.
4. Sheludiakov S., Ahokas J., Järvinen J., Lehtonen L., Vasiliev S., Dmitriev Yu.A., Lee D.M., Khmelenko V.V. Electron spin resonance study of atomic hydrogen stabilized in solid neon below 1 K // Phys. Rev. B. – 2018. – Vol. 97. – P. 104108.
5. Dmitriev Y.A., Benetis N.P. Quantum impurity rotator in a matrix of quantum rotors: Electron paramagnetic resonance dynamics of CH_3 in solid CD_4 matrix // J. Phys. Chem. A. – 2018. – Vol. 122. – P. 9483-9491.

6. Dmitriev Y.A., Zelenetckii I.A., Benetis N.P. Low-temperature matrix effects on orientational motion of Methyl radical trapped in gas solids: Angular tunneling vs. libratio // Phys. B. – 2018. – Vol. 537. – P. 51-57.
7. Dmitriev Y.A., Melnikov V.D., Zelenetckii I.A. Benetis N.P. Rotational states of methyl radical monitored by EPR line shape of matrix-isolated CH_3 in CO_2 and N_2O solids // J. Low Temp. Phys. – 2016. – Vol. 185. – P. 633-640.
8. Dmitriev, Y.A., Buscarino G., Benetis N.P. Methyl radical in clathrate silica voids. The peculiar physisorption features of the guest-host molecular dynamics interaction // J. Phys. Chem. A. – 2016. – Vol. 120. – P. 6155-6169.
9. Dmitriev Y.A., Melnikov V.D., Styrov K.G., Benetis N.P. CH_3 spin probe in solid Kr: matrix structure and guest-host interaction // Phys. B. – 2015. – Vol. 458. – P. 44-50.
10. Dmitriev Yu.A. EPR study of H and D atoms in quench-condensed solid D_2 // J. Low Temp. Phys. – 2015. – Vol. 180. – P. 284-314.

ФИО: Столяров Андрей Владиславович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без звания

Научная специальность: 02.00.17 - математическая и квантовая химия

Должность: заведующий кафедрой

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», химический факультет, кафедра лазерной химии

Адрес места работы: 119991, г. Москва, ул. Ленинские горы, 1, стр.3

Тел.: 8495-939-12-93

E-mail: avstol@phys.chem.msu.ru

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

1. Kozlov S., Bormotova E., Medvedev A. et al. A first principle study of the spin-orbit coupling effect in the LiM ($\text{M} = \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) molecules // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2020. — Vol. 22, no. 4. — P. 2295–2306.

2. Murga M.S., Wiebe D.S., Vasyunin A.I. et al. Experimental and theoretical studies of photo-induced reactions in the solid phase of the interstellar medium // *Russian Chemical Reviews*. — 2020. — Vol. 89, no. 4. — P. 430–448.
3. Bormotova E.A., Kozlov S.V., Pazyuk E.A. et al. Ab initio and analytical studies of the spin-orbit coupling in heteronuclear alkali-metal dimers AB (A, B = Li, Na, K, Rb) at long ranges // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. — 2019. — Vol. 99, no. 1. — P. 012507–1–012507–14.
4. Terashkevich V.A., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V., Wiebe D.S. An accurate ab initio electronic structure calculation for interstellar argonium // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2019. — Vol. 234. — P. 139–146.
5. Znotins A., Kruzins A., Tamanis M., Ferber R., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V., Zaitsevskii A. Fourier-transform spectroscopy, relativistic electronic structure calculation, and coupled-channel deperturbation analysis of the fully mixed $A1\Sigma^+$ and $b3\Pi$ states of Cs_2 // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. — 2019. — Vol. 100, no. 4. — P. 042507–11.
6. Medvedev A., Meshkov V., Stolyarov A., Heaven M.C. Ab initio interatomic potentials and transport properties of alkali metal (M = Rb, Cs) - rare gas (Rg = He, Ne, Ar, Kr, Xe) media // *Physical Chemistry Chemical Physics*. — 2018. — Vol. 20. — P. 25974–25982.
7. Klincare I., Kruzins A., Tamanis M. et al. Fourier-transform spectroscopy, direct potential fit, and electronic structure calculations on the entirely perturbed (4) 1π state of rbcS // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. — 2018. — Vol. 98. — P. 062517–9.
8. Zaitsevskii A., Mosyagin N.S., Stolyarov A.V., Eliav E. Approximate relativistic coupled-cluster calculations on heavy alkali-metal diatomics: Application to the spin-orbit-coupled $a1\Sigma^+$ and $b3\Pi$ states of rbcS and Cs_2 // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. — 2017. — Vol. 96, no. 2. — P. 022516–1–022516–9.
9. Medvedev E.S., Ushakov V.G., Stolyarov A.V., Gordon I.E. Intensity anomalies in the rotational and ro-vibrational spectra of diatomic molecules // *Journal of Chemical Physics*. — 2017. — Vol. 147, no. 16. — P. 164309.
10. Alps K., Kruzins A., Nikolayeva O., Tamanis M., Ferber R., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V. Energy and radiative properties of the (3) 1Π and (5) $1\Sigma^+$ states

of rbc: Experiment and theory // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2017. — Vol. 96, no. 2. — P. 022510.

ФИО: Мисочко Евгений Яковлевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: без звания

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

Должность: заведующий лабораторией

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, лаборатория кинетической ЭПР и молекулярной спектроскопии

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

Тел.: 8(49652) 2-12-80

E-mail: misochko@icp.ac.ru

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

1. Misochko E.Y., Akimov A.V., Korchagin D.V. et al. Purely spectroscopic determination of the spin hamiltonian parameters in high-spin six-coordinated cobalt(II) complexes with large zero-field splitting // Inorganic Chemistry. — 2019. — Vol. 58. — P. 16434-16444.
2. Korchagin D.V., Akimov A.V., Misochko E.Y. et al. Steric heavy atom effect on magnetic anisotropy of triplet tribromophenyl nitrenes // J. Phys. Chem. A. — 2018. — Vol. 122. — P. 8931-8937.
3. Akimov A.V., Ganushevich Y.S., Misochko E.Y. et al. The EPR spectrum of triplet mesitylphosphinidene: reassignment and new assignment // Angewandte Chemie International Edition. — 2017. — Vol. 56. — P. 7944-7947.
4. Korchagin D.V., Palii A.V., Misochko E.Y. et al. Evidence of field induced slow magnetic relaxation in cis-[Co(hfac)(2)(H2O)(2)] exhibiting tri-axial anisotropy with a negative axial component // Dalton Transactions. — 2017. — Vol. 46. — P. 7540-7548.

5. Palii A.V., Korchagin D.V., Misochko E.Y. et al. Single-ion magnet $\text{Et}_4\text{N}[\text{Co-II}(\text{hfac})(3)]$ with nonuniaxial anisotropy: Synthesis, experimental characterization, and theoretical modeling // Inorganic Chemistry. – 2016. – Vol. 55. – P. 9696-9706.
6. Korchagin D.V., Akimov A.V., Misochko E.Y. et al. Unexpected effect of substituents on the zero-field splitting of triplet phenyl nitrenes // Chem. Phys. Lett. – 2016. – Vol. 659. – P. 234-236.
7. Ivanov V.F., Gordon D.A., Misochko E.Y. et al. Biopolymer composites based on modified lignin and nanocellulose // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2016. – Vol. 89. – P. 1292-1295.

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

