

Сведения о научном руководителе диссертации

Рукина Павла Сергеевича

«Теоретическое моделирование влияния внутри- и межмолекулярных взаимодействий на спектральные свойства красителей, используемых в оптических хемосенсорах»

Научный руководитель: Багатурьянц Александр Александрович

Ученая степень: доктор химических наук (02-00-04 физическая химия)

Ученое звание: профессор

Должность : главный научный сотрудник

Место работы: Центр фотохимии РАН, Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и Фотоника» Российской академии наук»

Адрес места работы: ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, 119421, Россия, ул. Новаторов 7а, к. 1

Тел. : +7 495 936 25 88

E-mail : sasha@photonics.ru

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

1. Structures and Binding Energies of the Naphthalene dimer in its Ground and Excited States, JPCA, N.O. Dubinets, A.A. Safonov, A.A. Bagaturyants, J. Phys. Chem. A, 2016, 120 (17), pp 2779–2782, DOI 10.1021/acs.jpca.6b03761
2. Theoretical Study of the Spectral and Charge-Transport Parameters of an Electron-Transporting Material Bis(10-hydroxybenzo[h]qinolino)beryllium (Bebq2), Alexandra Yakovlevna Freidzon, Andrey Safonov, and Alexander A. Bagaturyants, J. Phys. Chem. C 2015, 119, 26817-26827 DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b08239
3. Fluorescence Spectra of (Dibenzoylmethanato)boron Difluoride Exciplexes with Aromatic Hydrocarbons: A Theoretical Study, A.A. Safonov, A.A. Bagaturyants, and V.A. Sazhnikov, J. Phys. Chem. A 2015, 119, 8182–8187. DOI: 10.1021/acs.jpca.5b03519
4. Electronic Structure and Energy Transfer in Europium(III)–Ciprofloxacin Complexes: A Theoretical Study, Tatiana B. Emelina, Alexandra Ya. Freidzon, Alexander A. Bagaturyants, and Vladimir E. Karasev, J. Phys. Chem. A, 2016, 120 (38), pp 7529–7537, DOI: 10.1021/acs.jpca.6b07258.
5. Thermodynamic stability of stoichiometric LaFeO₃ and BiFeO₃: a hybrid DFT study, Eugene Heifets, Eugene A. Kotomin, Alexander A. Bagaturyants and Joachim Maier, Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, 19, 3738–3755, DOI: 10.1039/c6cp07986e. Eugene Heifets, Eugene A. Kotomin, Alexander A. Bagaturyants and Joachim Maier, Phys. Chem. Chem. Phys., 2017, 19, 3738–3755.

Научный руководитель



д.х.н., проф. Багатурьянц А.А.

Подпись

Ученый секретарь

ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН



подпись, печать

к.ф.-м.н., Просеков П.А.



УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
ЧЕБУНЬКОВА А.В.