

Сведения об официальном оппоненте

Фамилия, Имя, Отчество:

Багатурьянц Александр Александрович

Ученая степень:

доктор наук

Отрасль науки:

химические науки

Ученое звание:

профессор

Научная специальность, по которой защищена диссертация:

02.00.04 — физическая химия

Полное название организации (основное место работы):

Центр фотохимии Российской академии наук Федерального государственного учреждения «Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»

Адрес организации (основного места работы):

119421 г. Москва, ул. Новаторов, д. 7а, корп. 1

Должность:

главный научный сотрудник

Структурное подразделение:

лаборатория квантовой химии и молекулярного моделирования

Список основных публикаций официального оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Freidzon A.Y., Bagaturyants A.A., Burdakov Y.V., Nikitenko V.R., Postnikov V.A. Anisotropic hole transport in a p-quaterphenyl molecular crystal: Theory and simulation // Journal of Physical Chemistry C. — 2021. — V. 125, № 23. — P. 13002–13013.

2. Krysko I.D., Freidzon A.Y., Bagaturyants A.A. Hole hopping in dimers of N,N' di(1-naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine (α -NPD): A theoretical study // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2020. — V. 22, № 6. — P. 3539–3544.

3. Dubinets N.O., Freidzon A.Y., Bagaturyants A.A. Use of effective fragment potentials for simulation of excited states in an inhomogeneous environment // International Journal of Quantum Chemistry. — 2020. — V. 120, № 2. — e26071: 1–10.

4. Freidzon A.Y., Bagaturyants A.A. In-depth ab initio study of thermally activated delayed fluorescence in 4,5-di(9 h-carbazol-9-yl)-phthalonitrile // The Journal of Physical Chemistry A. — 2020. — V. 124, № 39. — P. 7927–7934.

5. Heifets E., Bagaturyants A.A., Kotomin E.A., Maier J. Thermodynamic stability of non-stoichiometric $\text{SrFeO}_{3-\delta}$: A hybrid DFT study // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2019. — V. 21, № 7. — P. 3918–3931.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.243.02
кандидат физико-математических наук



С.Ю. Сарвадий

28 сентября 2022 года