

## Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Белоголовой А. М. «Методы электронного пропагатора для изучения молекулярных состояний, образующихся при отрыве и присоединении электрона»

<b>ФИО оппонента</b>	Плахутин Борис Николаевич
<b>Ученая степень (с указанием отрасли науки, шифра и наименования научной специальности, по которым защищена диссертация)</b>	Доктор физико-математических наук, Специальность: 02.00.17 – квантовая химия и математическое моделирование, Дата защиты – 29.06.1995, Место защиты – г. Москва, МГУ им. М.В.Ломоносова, химический факультет
<b>Ученое звание</b>	-
<b>Полное наименование организации, являющейся основным местом работы оппонента на момент представления отзыва</b>	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр Институт катализа им. Г. К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»
<b>Должность, занимаемая оппонентом в организации</b>	Ведущий научный сотрудник
<b>Наименование подразделения</b>	Отдел механизмов каталитических реакций
<b>Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)</b>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. B.N. Plakhutin. Brillouin's theorem in the Hartree-Fock method: Eliminating the limitation of the theorem for excitations in the open shell / <i>J. Chem. Phys.</i> 2020. V.153. P. 224110/1-9.</li><li>2. B.N. Plakhutin. Koopmans' theorem in the Hartree-Fock method. General formulation / <i>J. Chem. Phys.</i> 2018. V. 148, P. 094101/1-17.</li><li>3. E.P. Chuhmanov, N.L. Ermolaev, B.N. Plakhutin, S.K. Ignatov. Tris(perfluoroalkyl)germylethynyl derivatives of biphenyl containing ferrocenyl donor group: structure, spectra, and photoinduced intramolecular electron transfer / <i>Comput. and Theoret. Chemistry</i>, 2018. V. 1123, P. 50-60.</li><li>4. B.N. Plakhutin, A.V. Novikov, N.E. Polygalova, T.E. Prokhorov. On the ordering of orbital energies in the ROHF method: Koopmans' theorem versus Aufbau principle / <i>Progress in Theoretical Chemistry and Physics</i>, ed. by A. Tadjer, J. Maruani, E. J. Brandas, G. Delgado-Barrio / Springer, Berlin, 2017. V. 30, P. 17-37.</li><li>5. Б.Н. Плахутин. "Общая форма полного одноэлектронного гамильтониана в ограниченном методе Хартри-Фока для открытых оболочек // <i>Ж. Структ. Химии</i>. 2014. Т. 55, No. 6, С. 1055-1063.</li><li>6. B.N. Plakhutin, E.R. Davidson. Canonical form of the Hartree-Fock orbitals in open-shell systems / <i>J. Chem. Phys.</i> 2014. V. 140, P. 014102/1-15.</li></ol>