

ФОРМА

списка публикаций соискателя для заполнения
(приложение к Заявлению о приеме диссертации к защите)

СПИСОК

**публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации
на соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 02.00.09 «Химия высоких энергий» на тему: «Разработка вычислительных моделей и методов для рационального дизайна
фотоактивируемых молекулярных систем на основе низкомолекулярных соединений и белковых молекул»,
опубликованных в рецензируемых изданиях**

Рязанцев Михаил Николаевич

Author ID (Scopus) – 25722313700
Researcher ID (Web of Science) - B-8768-2012
SPIN (РИНЦ) _____
ORCID - 0000-0003-3413-1706

№ п/п	Название публикации на языке оригинала	Тип публикации	DOI	Наименование издания	ISSN издания	Группы научных специальностей/ научные специальности, в которых имеет право публиковать журнал	Выходные данные публикации (Номер тома, Номер части тома, Номер журнала, Страницы размещения публикации в журнале, Год)	Объем публикации (лист)*	Соавторы (Ф.И.О.)	Интернет-адрес публикации в журнале	Библиографическая база данных (eLIBRARY, Web of Science, Scopus и др.)	№ публикации в списке литературы диссертации	№ страницы диссертации, на которой приводится ссылка на данную публикацию
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	An artificial molecular switch that mimics the visual pigment and completes its photocycle in picoseconds	статья	10.1073/pnas.0802376105	Proceedings of the National Academy of Sciences	1091-6490	Математика, Механика, Астрономия, Физика, Химические науки, Биологические науки, Геолого-минералогические науки, Технические науки, Медицинские науки	Т. 105, № 46, стр. 17642-17647	6/2.5	Sinicropi, Adalgisa, Elena Martin, Jan Helbing, Julien Briand, Divya Sharma, Jérémie Léonard и др.	https://www.pnas.org/content/105/46/17642.short	Scopus (eiWd=2-s2.0-56849105213); Web of Science	49	19, 125
2	Acceleration of the Z to E	статья	10.1039/B900	Physical Chemistry	1463-9076	Химические науки	Т. 11, № 30, стр. 6404-6414	9/7	Masato Sumita,	https://pubs.rsc.org/en/	Scopus (eid=2-s2.0-68849129416); Web	50	19, 99

	photoisomerization of penta-2,4-dieniminium by hydrogen out-of-plane motion: theoretical study on a model system of retinal protonated Schiff base.		882A	Chemical Physics					Kazuya Saito	content/articlelanding/2009/cp/b900882a/author#!divAbstract	of Science		
3	Modeling, preparation, and characterization of a dipole moment switch driven by Z/E photoisomerization	статья	10.1021/ja906733q	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	Химические науки	Т. 132, № 27, стр. 9310-9319	10/5.5	Alfonso Melloni, Riccardo Rossi Paccani, Donato Donati, Vinicio Zanirato, Adalgisa Sinicropi и др.	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja906733q	Scopus (eid= 2-s2.0-77955781531), Web of Science	52	19, 141
4	Computational photobiology and beyond	статья	10.1071/CH09563	Australian Journal of Chemistry	0004-9425	Химические науки	Т. 63, №3, стр. 413-429	17/3.5	Igor Schapiro, Wan Jian Ding, Mark M Huntress, Federico Melaccio, Tadeusz Andruniow, Massimo Olivucci	https://www.publish.csiro.au/ch/CH09563	Scopus (eid=2-s2.0-77950225543), Web of Science	51	19
5	The ultrafast photoisomerizations of rhodopsin and bathorhodopsin are modulated by bond length alternation and HOOP driven electronic effects	статья	10.1021/ja1056196	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	Химические науки	Т. 133, № 10, стр. 3354-3364	11/7	Igor Schapiro, Luis Manuel Frutos, Nicolas Ferré, Roland Lindh, Massimo Olivucci	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja1056196	Scopus (eid=2-s2.0-79952601991)	41	9, 19
6	Color tuning in rhodopsins: The origin of	статья	10.1021/ja3009117	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	Химические науки	Т. 134, № 12, стр. 5520-5523	4/3.5	Ahmet Altun, Keiji Morokuma	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja	Scopus (eid= 2-s2.0-84859154610), Web of Science	26	7, 19, 55

	the spectral shift between the chloride-bound and anion-free forms of halorhodopsin									3009117			
7	5-azido-2-aminopyridine, a new nitrene/nitrenium ion photoaffinity labeling agent that exhibits reversible intersystem crossing between singlet and triplet nitrenes	статья	10.1021/ja405637b	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	Химические науки	Т. 135, №51, стр. 19167-19179	13/3.5	Maxim S Panov, Valentyna D Voskresenska, Alexander N Tarnovsky, R Marshall Wilson	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja405637b	Scopus (eid= 10.1021/ja405637b), Web of Science	53	19, 158
8	Ан Experimental and Theoretical Study on the Formation of 2-Methylnaphthalene (C ₁₁ H ₁₀ /C ₁₁ H ₃ D ₇) in the Reactions of the Para-Tolyl (C ₇ H ₇) and Para-Tolyl-d ₇ (C ₇ D ₇) with Vinylacetylene (C ₄ H ₄)	статья	10.1021/jp501210d	Journal of Physical Chemistry A	1089-5639	Химические науки	Т. 118, № 15, стр. 2709-2718	10/3	Dorian S.N. Parker, Beni B/ Dangi, Ralf I. Kaiser, Adeel Jamal, Keiji Morokuma, André Korte, Wolfram Sander	https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp501210d	Scopus (eid= 2-s2.0-84898928849), Web of Science	54	19, 173
9	Formation of 6-Methyl-1,4-dihydronaphthalene in the Reaction of the p-Tolyl Radical with 1,3-Butadiene under Single-Collision Conditions	статья	10.1021/jp509990u	Journal of Physical Chemistry A	1089-5639	Химические науки	Т. 118, № 51, стр. 12111-12119	9/2	Dorian S.N. Parker, Beni B. Dangi, Ralf I. Kaiser, Adeel Jamal, Keiji Morokuma	https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp509990u	Scopus (eid= 2-s2.0-84919934072), Web of Science	55	19, 173
10	Global	статья	10.103	Physical	1463-9076	Химические науки	Т. 17, № 41,	17/9	Adeel Jamal,	https://pubs	Scopus (eid= 2-s2.0-	56	19, 173

	investigation of potential energy surfaces for the pyrolysis of C ₁ -C ₃ hydrocarbons: toward the development of detailed kinetic models from first principles		9/c5cp04329h	Chemistry Chemical Physics			стр. 27789-27805		Satoshi Maeda, Keiji Morokuma	.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/CP/C5CP04329H#divAbstract	84944342496)		
11	A voltage-dependent fluorescent indicator for optogenetic applications, archaerhodopsin-3: Structure and optical properties from in silico modeling	статья	10.12688/f1000research.10541.1	F1000 Research	2046-1402	Химические науки, Биологические науки, Медицина	Т. 6, № 33	8/7	Dmitrii M Nikolaev, Anton Emelyanov, Vitaly M Boitsov, Maxim S Panov	https://f1000research.com/articles/6-33/v3	Scopus (eid=2-s2.0-85052834333)	57	19
12	A comparative study of modern homology modeling algorithms for rhodopsin structure prediction	статья	10.1021/acsomega.8b00721	ACS Omega	2470-1343	Химические науки	Т. 3, № 7, стр. 7555-7566	12/11	Dmitrii M Nikolaev, Andrey A Shtyrov, Maxim S Panov, Adeel Jamal, Oleg B Chakchir, Vladimir A Kochemirovsky, Massimo Olivucci	https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acsomega.8b00721	Scopus (eid=2-s2.0-85049981722); Web of Science	58	19, 69
13	Quantum mechanical and molecular mechanics modeling of membrane-embedded rhodopsins	статья	10.1007/s00232-019-00095-0	Journal of Membrane Biology	0022-2631	Химические науки, Биологические науки	Т. 252, № 4-5, стр. 425-449	25/14	Dmitrii M Nikolaev, Andrey V Struts, Michael F Brown	https://link.springer.com/article/10.1007/s00232-019-00095-0	Scopus (eid= 2-s2.0-85073556367), Web of Science	60	19
14	Molecular mechanisms of adaptation to the habitat depth in visual	статья	10.5584/jiomics.v9i1.273	Journal of Integrated OMICS	2182-0287	Химические науки, Биологические науки	Т. 9, № 1, стр. 44-50	7/6	Dmitrii M Nikolaev, Demid E Osipov, Daniil M	http://www.jiomics.com/index.php/jio/article/view/Articl	Scopus (eid= 2-s2.0-85071779892), Web of Science	59	19

	pigments of A. subulata and L. forbesi squids: On the role of the S270F substitution								Strashkov, Sergey Yu Vyazmin, Vasily E Akulov, Denis V Kravtsov, Oleg B Chakchir, Maxim S Panov	e/273			
15	Программный комплекс ReaNet для автоматического моделирования путей термических химических реакций и фотохимических реакций	свидетельство на программу для электронных вычислительных машин	https://www1.fips.ru/register-s-doc-view/fips_server?DB=EVM&DocNumber=2020615220&TypeFile=html	Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем»	2313-7487	Математическое моделирование, численные методы и комплексы программа	№ 5 (май 2020), 2020615220	1	Догонашева О.А., Новиков Г.С., Штыров А.А., Николаев Д.М.	https://www1.fips.ru/ftpstorage/BULLETIN/PrEVM/20/05/20/INDEX.HTM	Официальный бюллетень Роспатента	62	19, 173

Подтверждаю, что все основные научные результаты моей диссертации «Разработка вычислительных моделей и методов для рационального дизайна фотоактивируемых молекулярных систем на основе низкомолекулярных соединений и белковых молекул» опубликованы в вышеприведенных 14 публикациях и свидетельстве на программу для электронных вычислительных машин.

В случае необходимости готов предоставить электронные/бумажные тексты публикаций с титульной страницей издания и его выходными данными.

Дата 25.06.2020

Разонцев
Дмитрий Николаевич _____ подпись 