

## СПИСОК

**публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации  
на соискание ученой степени доктора химических наук  
по научной специальности 1.4.4. Физическая химия на тему «Диагностика комплексов с водородной связью и переходом протона по  
низкотемпературным спектрам ЯМР», опубликованных в рецензируемых изданиях**

*Толстой Петр Михайлович*

Author ID (Scopus) – 6602295036

Researcher ID (Web of Science) – J-2966-2013

SPIN (РИНЦ) – 6838-2408

ORCID – 0000-0002-8426-3988

№ п/п	Название публикации на языке оригинала (при иноязычном названии – перевод на англ. / русс. яз.)	Тип публикации	DOI	Наименование издания	ISSN издания	Выходные данные публикации (Номер тома, Номер части тома, Номер журнала, Страницы размещения публикации в журнале, Год)	Интернет - адрес публикации в журнале	Библиографическая база данных (eLIBRARY, Web of Science, Scopus и др.), в которой индексируется публикация	№ публикации в списке литературы диссертации	№ страницы диссертации, на которой приводится ссылка на публикацию	Объем публикации (печ., л/вт. л., личн. вклад)*	Соавторы
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	Hydrogen/Deuterium Isotope Effects on NMR Chemical Shifts of Formally Symmetric Complexes with a Strong Intermolecular Hydrogen Bond in Liquid Solutions at 100-150 K (Водород/дейтериевые изотопные эффекты на химических сдвигах ЯМР формально симметричных комплексов с сильными межмолекулярными водородными связями в жидких растворах при 100-150 K)	Научная статья	10.1021/ja0017615	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	2000, Т. 122, № 51, С. 12878-12879.	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja0017615">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja0017615</a>	WoS Scopus	1	12	2/0.5	P. Schah-Mohammedi, I.G. Shenderovich, C. Detering, H.-H. Limbach, S.N. Smimov, всего 7 человек
2	Видинальные H/D изотопные эффекты в спектрах ЯМР комплексов с кооперативно взаимодействующими водородными связями. Фосфорные кислоты. (Vicinal H/D Isotope Effects in NMR Spectra of Complexes with Coupled Hydrogen Bonds. Phosphoric Acids)	Научная статья	10.1023/A:1019290114622	Доклады Академии Наук Doklady Physical Chemistry	0869-5652	2001. Т. 379. № 1-3. С. 191-193.	<a href="https://www.elibrary.ru/item.asp?id=44663874">https://www.elibrary.ru/item.asp?id=44663874</a>	РИНЦ	2	12	4/2	К. Детеринг, Н.С. Голубев, Г.С. Денисов, Х.-Х. Лимбах



3	Characterization of Fluxional Hydrogen-Bonded Complexes of Acetic Acid and Acetate by NMR: Geometries and Isotope and Solvent Effects (Характеризация подвижных водородносвязанных комплексов уксусной кислоты и ацетата при помощи ЯМР: геометрии, изотопные эффекты и эффекты растворителя)	Научная статья	10.1021/ja039280j	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	2004, Т. 126, № 17, С. 5621-5634.	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja039280j">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja039280j</a>	WoS Scopus	3	12	14/10	P. Schah-Mohammedi, S.N. Smimov, N.S. Golubev, G.S. Denisov, H.-H. Limbach
4	NMR studies of solid state—solvent and H/D isotope effects on hydrogen bond geometries of 1:1 complexes of collidine with carboxylic acids (ЯМР исследования эффектов раствор-твердое тело и изотопных эффектов на геометрии водородной связи в комплексах 1:1 коллидина с карбоновыми кислотами)	Научная статья	10.1016/j.molstruc.2004.02.023	Journal of Molecular Structure	0022-2860	2004, Т. 700, № 1-3, С. 19-27.	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286004001334">https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286004001334</a>	WoS Scopus	4	12	9/7	S.N. Smimov, I.G. Shenderovich, N.S. Golubev, G.S. Denisov, H.-H. Limbach
5	Empirical corrections for anharmonic zero-point vibrations of hydrogen and deuterium in geometric hydrogen bond correlations (Эмпирические поправки к ангармоническим нулевым колебаниям протона и дейтрона в геометрических корреляциях водородных связей)	Научная статья	10.1016/j.molstruc.2004.03.006	Journal of Molecular Structure	0022-2860	2004, Т. 706, № 1-3, С. 115-119	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286004001632">https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286004001632</a>	WoS Scopus	5	12	5/2	H.-H. Limbach, M. Pietrzak, H. Benedict, N.S. Golubev, G.S. Denisov
6	NMR Parameters and Geometries of OHN and ODN Hydrogen Bonds of Pyridine-Acid Complexes (Параметры ЯМР и геометрии водородных связей OHN и ODN в комплексах пиридин-кислота)	Научная статья	10.1002/chem.200400212	Chemistry – A European Journal	0947-6539	2004, 10, 5195-5204	<a href="https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200400212">https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200400212</a>	WoS Scopus	6	12	10/4	H.-H. Limbach, M. Pietrzak, S. Sharif, I.G. Shenderovich, S.N. Smimov, всего 7 человек
7	Low-temperature NMR spectra of fluoride-acetic acid hydrogen-bonded complexes in aprotic polar environment (Низкотемпературные спектры ЯМР водородносвязанного комплекса фторид-уксусная кислота в апротонной полярной среде)	Научная статья	10.1016/j.molstruc.2004.01.024	Journal of Molecular Structure	0022-2860	2004, Т. 700, № 1-3, С. 3-12.	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286004000705">https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286004000705</a>	WoS Scopus	7	12	10/7	N.S. Golubev, S.N. Smimov, G.S. Denisov, H.-H. Limbach
8	OHO Hydrogen Bond Geometries and NMR Chemical Shifts: From Equilibrium Structures to Geometric H/D Isotope Effects with Applications for Water, Protonated Water and Compressed Ice” (Геометрия и химические сдвиги ЯМР в водородных связях ОНО: от равновесных структур к геометрическим H/D изотопным эффектам с применением к воде, протонированной воде и сжатому льду)	Научная статья	10.1560/IJC.49.2.199	Israel Journal of Chemistry	1869-5868	2009, Т. 49, № 2, С. 199-216.	<a href="https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1560/IJC.49.2.199">https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1560/IJC.49.2.199</a>	WoS Scopus	8	12	18/9	H.-H. Limbach, N. Perez-Hernandez, J. Guo, I.G. Shenderovich, G.S. Denisov
9	Combined NMR/UV-Vis Spectroscopy in the Liquid State: Study of the Geometries of Strong OHO Hydrogen Bonds of Phenols with Carboxylic Acids (Комбинированная ЯМР/УФ спектроскопия в жидком состоянии: изучение геометрии сильных водородных связей ОНО между фенолами и карбоновыми кислотами)	Научная статья	10.1002/anie.200806181	Angewandte Chemie International Edition	1433-7851	2009, 48, 5745-5747	<a href="https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.200806181">https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.200806181</a>	WoS Scopus	9	13	4/3	B. Koeppel, G.S. Denisov, H.-H. Limbach

10	Geometries and Tautomerism of OHN Hydrogen Bonds in Aprotic Solution Probed by H/D Isotope Effects on <sup>13</sup> C NMR Chemical Shifts (Геометрии и таутомерия в водородных связях OHN в апротонных растворах, изучение с помощью H/D изотопных эффектов на химических сдвигах <sup>13</sup> C ЯМР)	Научная статья	10.1021/jp1027146	Journal of Physical Chemistry A	1089-5639	2010, T. 114, № 40, C. 10775-10782.	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp1027146">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp1027146</a>	WoS Scopus	10	13	8/6	J. Guo, B. Koeppel, N.S. Golubev, G.S. Denisov, S.N. Smimov, всего 6 человек
11	Encapsulated carboxylic acid dimers with compressed hydrogen bonds (Инкапсулированные карбоновые кислоты со сжатыми водородными связями)	Научная статья	10.1002/anie.201002182	Angewandte Chemie International Edition	1433-7851	2011, T. 50, № 2, C. 528-531.	<a href="https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.201002182">https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.201002182</a>	WoS Scopus	11	13	4/2	D. Ajami, H. Dube, S. Odermatt, B. Koeppel, J. Guo, всего 7 человек
12	Trimethylglycine Complexes with Carboxylic Acids and HF: Solvation by Polar Aprotic Solvent (Комплексы триметилглицина с карбоновыми кислотами и HF: сольватирование полярным апротонным растворителем)	Научная статья	10.1039/C0CP01659D	Physical Chemistry Chemical Physics	1463-9076	2011, T. 13, C. 2335-2341	<a href="https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2011/cp/c0cp01659d">https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2011/cp/c0cp01659d</a>	WoS Scopus	12	13	7/5	J. Guo, B. Koeppel
13	NMR Study of Conformational Exchange and Geometries of Intramolecular Hydrogen Bonds in Monoanions of Succinic Acid and Derivatives (ЯМР изучение конформационного обмена и геометрий внутри-молекулярных водородных связей в моноанионах янтарных кислот и их производных)	Научная статья	10.1021/jp201073j	Journal of Physical Chemistry A	1089-5639	2011, T. 115, № 35, C. 9828-9836	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp201073j">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp201073j</a>	WoS Scopus	13	13	9/7	J. Guo, B. Koeppel, G.S. Denisov, H.-H. Limbach
14	Reaction Pathways of Proton Transfer in Hydrogen bonded Phenol-Carboxylate Complexes explored by UVNMR (Координата реакции перехода протона в водородносвязанных фенол-карбоксилатных комплексах, исследуемая при помощи ЯМР/УФ)	Научная статья	10.1021/ja201113a	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	2011, T. 133, № 20, C. 7897-7908	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja201113a">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja201113a</a>	WoS Scopus	14	13	12/9	B. Koeppel, H.-H. Limbach
15	Two-dimensional UV-vis/NMR Correlational Spectroscopy: A Heterospectral Signal Assignment of Hydrogen-Bonded Complexes (Двумерная корреляционная ЯМР/УФ спектроскопия: гетеро-спектральное отнесение сигналов водородносвязанных комплексов)	Научная статья	10.1021/jz200285c	Journal of Physical Chemistry Letters	1948-7185	2011, T. 2, № 9, C. 1106-1110	<a href="https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jz200285c">https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jz200285c</a>	WoS Scopus	15	13	5/4	B. Koeppel, E.T.J. Nibbering, T. Elsaesser
16	Hydrogen Bond Geometries and Proton Tautomerism of Homo-Conjugated Anions of Carboxylic Acids Studied via H/D Isotope Effects on <sup>13</sup> C NMR Chemical Shifts (Геометрии водородных связей и протонная таутомерия в гомо-сопряженных анионах карбоновых кислот, изученные по H/D изотопным эффектам на химических сдвигах <sup>13</sup> C ЯМР)	Научная статья	10.1021/jp304943h	Journal of Physical Chemistry A	1089-5639	2012, T. 116, № 46, C. 11180-11188	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp304943h">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp304943h</a>	WoS Scopus	16	13	9/6	J. Guo, B. Koeppel, N.S. Golubev, G.S. Denisov, S.N. Smimov, всего 6 человек

*Мамон*

17	Solvent and H/D Isotope Effects on the Proton Transfer Pathways in Heteroconjugated Hydrogen-Bonded Phenol-Carboxylic Acid Anions Observed by Combined UV-vis and NMR Spectroscopy (Эффекты растворителя и H/D изотопные эффекты на реакции перехода протона в гетеро-сопряженных водородносвязанных анионах фенол-карбоксилат, наблюдаемые с помощью комбинированной УФ и ЯМР спектроскопии)	Научная статья	10.1021/ja400611x	Journal of the American Chemical Society	0002-7863	2013, Т. 135, № 20, С. 7553-7566.	<a href="https://proxy.library.spbu.ru:2136/doi/10.1021/ja400611x">https://proxy.library.spbu.ru:2136/doi/10.1021/ja400611x</a>	WoS Scopus	17	13	14/10	B. Koeppel, J. Guo, G.S. Denisov, H.-H. Limbach
18	Proton transfer in a short hydrogen bonded complex caused by solvation shell fluctuations: an ab initio MD and NMR/UV study of an (ОНО)-bonded system (Переход протона в комплексах с короткой водородной связью, вызванный флуктуациями сольватной оболочки: ab initio молекулярная динамика и ЯМР/УФ исследование (ОНО)-связанной системы)	Научная статья	10.1039/c4cp04727c	Physical Chemistry Chemical Physics	1463-9076	2015, Т. 17, С. 4634-4644	<a href="https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/cp/c4cp04727c">https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/cp/c4cp04727c</a>	WoS Scopus	18	13	11/7	S. Pylaeva, C. Allolio, B. Koeppel, G.S. Denisov, H.-H. Limbach, всего 6 человек
19	Polar solvent fluctuations drive proton transfer in hydrogen bonded complexes of carboxylic acid with pyridines: NMR, IR and ab initio MD study (Флуктуации полярного растворителя вызывают переход протона в водородносвязанных комплексах карбоновых кислот с пиридинами: исследование с помощью ЯМР, ИК и ab initio молекулярной динамики)	Научная статья	10.1039/c6cp06677a	Physical Chemistry Chemical Physics	1463-9076	2017, Т. 19, С. 1010-1028	<a href="https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/cp/c6cp06677a">https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/cp/c6cp06677a</a>	WoS Scopus	19	13	19/10	B. Koeppel, S.A. Pylaeva, C. Allolio, D. Sebastiani, E.T.J. Nibbering, всего 7 человек
20	Symmetry and dynamics of FHF <sup>-</sup> anion in vacuum, in CD <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> and in CCl <sub>4</sub> . Ab initio MD study of fluctuating solvent-solute hydrogen and halogen bonds (Симметрия и динамика аниона FHF <sup>-</sup> в вакууме, CD <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> и CCl <sub>4</sub> . Ab initio молекулярная динамика флуктуаций водородных и галогенных связей растворитель-растворенное вещество)	Научная статья	10.1039/c7cp04493c	Physical Chemistry Chemical Physics	1463-9076	2017, Т. 19, С. 26107-26120	<a href="https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/cp/c7cp04493c">https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/cp/c7cp04493c</a>	WoS Scopus	20	14	14/9	S.A. Pylaeva, H. Elgabarty, D. Sebastiani
21	Cyclic Trimers of Phosphinic Acids in Polar Aprotic Solvent: Symmetry, Chirality and H/D Isotope Effects on NMR Chemical Shifts (Циклические тримеры фосфиновых кислот в полярной апротонном растворителе: симметрия, хиральность и H/D изотопные эффекты на химических сдвигах ЯМР)	Научная статья	10.1039/c8cp08130h	Physical Chemistry Chemical Physics	1463-9076	2018, Т. 20, С. 4901-4910	<a href="https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/cp/c8cp08130h">https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/cp/c8cp08130h</a>	WoS Scopus	21	14	10/8	V.V. Mulloyarova, I.S. Giba, M.A. Kostin, G.S. Denisov, I.G. Shenderovich,
22	Conformational mobility and proton transfer in hydrogen-bonded dimers and trimers of phosphinic and phosphoric acids (Конформационная мобильность и переход протона в водородносвязанных димерах и тримерах фосфиновых и фосфорных кислот)	Научная статья	10.1021/acs.jpca.9b05184	Journal of Physical Chemistry A	1089-5639	2019, Т. 123, С. 6761-6771	<a href="https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.9b05184">https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.9b05184</a>	WoS Scopus	22	14	11/9	V.V. Mulloyarova, I.S. Giba, G.S. Denisov

23	H/D Isotope Effects on $^1\text{H}$ NMR Chemical Shifts in Cyclic Heterodimers and Heterotrimers of Phosphinic and Phosphoric Acids (H/D изотопные эффекты на химических сдвигах $^1\text{H}$ ЯМР в циклических гетеродимерах и гетеротримерах фосфиновых и фосфорных кислот)	Научная статья	10.3390/molecules25081907	Molecules	1420-3049	2020, Т. 25, С. 1907	<a href="https://www.mdpi.com/1420-3049/25/8/1907">https://www.mdpi.com/1420-3049/25/8/1907</a>	WoS Scopus	23	14	17/12	V.V. Mulloyarova, D.O. Ustimchuk, A. Filarowski
24	Solid-State and Solution-State Self-Association of Dimethylarsinic Acid: IR, NMR and Theoretical Study (Самоассоциация диметиларсиновой кислоты с твердом теле и в растворе: ИК, ЯМР и теоретическое исследование)	Научная статья	10.1016/j.molstruc.2021.130176	Journal of Molecular Structure	0022-2860	2021, Т. 1234, С. 130176	<a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286021003070">https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286021003070</a>	WoS Scopus	24	14	9/5	V.V. Mulloyarova, A.M. Puzyk, A.A. Efimova, A.S. Antonov, R.A. Evarestov, всего 7 человек
25	Self-assembly of tetrahedral hydrogen-bonded cage tetramers of phosphonic acid (Самосборка тетраэдрических водородосвязанных тетрамеров фосфоновой кислоты)	Научная статья	10.3390/sym13020258	Symmetry	2073-8994	2021, Т. 13, С. 258	<a href="https://www.mdpi.com/2073-8994/13/2/258">https://www.mdpi.com/2073-8994/13/2/258</a>	WoS Scopus	25	14	12/9	I.S. Giba
26	Combined NMR and UV-Vis Spectroscopic Studies of Models for the Hydrogen Bond System in the Active Site of Photoactive Yellow Protein: H-Bond Cooperativity and Medium Effects (Комбинированные ЯМР и УФ спектральные исследования моделей системы водородных связей в активном центре фотоактивного желтого белка: кооперативность водородных связей и эффекты среды)	Научная статья	10.1021/acs.jpcc.0c09923	Journal of Physical Chemistry B	1520-6106	2021, Т. 125, № 22, С. 5874-5884	<a href="https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.0c09923">https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.0c09923</a>	WoS Scopus	26	14	11/7	B. Koeppel, J. Guo, H.-H. Limbach

Подтверждаю, что все основные научные результаты моей диссертации «Диагностика комплексов с водородной связью и переходом протона по низкотемпературным спектрам ЯМР» опубликованы в вышеприведенных 26-ти публикациях, в том числе: в рецензируемых научных изданиях из перечня, утвержденного Минобрнауки РФ - 1 публикация; в изданиях, индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science и Scopus – 25 публикаций.

Вышеуказанные публикации прилагаются на электронном носителе.



02.12.2021

/ П.М. Толстой /