

Сведения об оппоненте

по диссертации Тупикиной Елены Юрьевны

на тему «Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики» по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Фамилия Имя Отчество	Кетков Сергей Юлиевич
Ученая степень, шифр и название специальности (которые были получены при защите), ученое звание	Доктор химических наук, 02.00.08 – химия элементоорганических соединений, 02.00.04 – физическая химия
Основное место работы (полное и сокращенное наименование организации в соответствии с уставом), почтовый адрес	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук, ИМХ РАН
Должность, подразделение	Заведующий лабораторией Цифровой и структурной химии металлокомплексов
Почтовый адрес оппонента (можно указывать адрес места работы, указать индекс)	603950, г. Нижний Новгород, ГСП-445, ул. Тропинина, д. 49
Телефон	+7 (831) 462-77-09
Адрес электронной почты	sketkov@iomc.ras.ru

Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)

1. S.Yu. Ketkov, S.Y. Tzeng, E.A. Rychagova, A.N. Lukoyanov, W.B. Tzeng. Effect of a single methyl substituent on the electronic structure of cobaltocene studied by computationally assisted MATI spectroscopy // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2024. – Vol. 26. – P. 1046–1056.
2. M.A. Katkova, G.S. Zabrodina, R.V. Rumyantsev, G.Yu. Zhigulin, M.S. Muravyeva, A.S. Shavyrin, D.G. Sheven, S. Yu. Ketkov. Praseodymium metallacrown-based NMR probe for enantioselective discrimination of mandelate anions in water // Inorg. Chem. – 2023. – Vol. 62. – P. 3827–3835.
3. P. Novák, M. Erben, R. Jambor, M. Hejda, A. Růžicka, E.A. Rychagova, S.Yu. Ketkov, L. Dostál. The reactivity of antimony and bismuth N, C, N-pincer compounds toward $K[BEt_3H]^-$ the formation of heterocyclic compounds vs. element–element bonds vs. stable terminal Sb–H bonds // Dalton Trans. – 2023. – Vol. 52. – P. 218–227.
4. T.S. Koptseva, A.A. Skatova, S.Yu. Ketkov, E.A. Rychagova, R.V. Rumyantsev, I.L. Fedushkin. Hydroboration of a Diolate Complex Obtained by Carbon Dioxide Capture with Acenaphthenediimine Aluminum Hydride // Organometallics. – 2022. – Vol. 42. – P. 123–131.
5. R.R. Valiev, T. Kurten, L.I. Valiulina, S. Yu. Ketkov, V. N. Cherepanov, M. Dimitrova, D. Sundholm. Magnetically induced ring currents in metallocenothiaporphyrins // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2022. – Vol. 24. – P. 1666–1674.
6. J. Zechovský, V. Kremláček, M. Erben, M. Hejda, E.A. Rychagova, R. Jambor, A. R., S.Yu. Ketkov, L. Dostál. Beyond simple hetero Diels–Alder cycloadditions. A new type of element–ligand cooperativity at N, C, N-coordinated arsinidene and stibinidene centres in the reaction with an electron-deficient alkyne // Dalton Trans. – 2022. – Vol. 51. – P. 15933–15945.

7. F. Feige, L.A. Malaspina, E. Rychagova, **S.Yu. Ketkov**, S. Grabowsky, E. Hupf, J. Beckmann. Perfluorinated Trialkoxysilanol with Dramatically Increased Brønsted Acidity // Chem. Eur. J. – 2021. – Vol. 27. – P. 15898–15902.
8. M. Hejda, D. Duvinage, E. Lork, A. Lyčka, Z. Černošek, J. Macháček, S. Makarov, **S.Yu. Ketkov**, S. Mebs, L. Dostál, J. Beckmann. Lewis Superacidic Tellurenyl Cation-Induced Electrophilic Activation of an Inert Carborane // Chem. Eur. J. – 2021. – Vol. 27. – P. 14577–14581.
9. N.L. Bazyakina, V.M. Makarov, **S.Yu. Ketkov**, A.S. Bogomyakov, R.V. Rumyantsev, V.I. Ovcharenko, I.L. Fedushkin. Metal–Organic Frameworks Derived from Calcium and Strontium Complexes of a Redox-Active Ligand // Inorg. Chem. – 2021. – Vol. 60. – P. 3238–3248.
10. N. L. Bazyakina, A. A. Skatova, M.V. Moskalev, E.V. Baranov, T.S. Koptseva, **S.Y. Ketkov**, I.L. Fedushkin. Synthesis and Reactivity of Stable Open-Shell Gallylene // Inorg. Chem., 2025, 64(10), 4892-4901.
11. G. Yu. Zhigulin, M. A. Katkova, **S. Yu. Ketkov**, Computational prediction of supramolecular assembly based on pentacopper(II) 12-MC-4 metallamacrocycles with 3-hydroxy-4-pyridinone moieties // Comput. Theor. Chem., 2025, 1254, 115523.
12. **S. Yu. Ketkov**, S.-Y. Tzeng, E. A. Rychagova, A. N. Lukoyanov, G. V. Markin, W.-B. Tzeng, Intriguing methylation effects in cobaltocene revealed by high-resolution MATI spectroscopy and *ab initio* calculations of $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{Me})_2\text{Co}$ // J. Chem. Phys., 2025, 163, 21, 214302/
13. **S Ketkov**, E Rychagova, R Kather, J Beckmann, Pnictogen effects on the electronic interactions in the Lewis pair complexes $\text{Ph}_3\text{EB}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$ (E= P, As, Sb) // J. Organomet. Chem., 2021, 949, 121944.
14. G. Zhigulin, G. Zabrodina, E.V. Baranov, M. Katkova, **S. Ketkov**, The K^+/Y^{3+} cationic exchange in a C_5 -symmetric metallamacrocyclic scaffold: DFT examination with QTAIM, ELF, MEP approaches and XRD study of the final alaninehydroximate complex // J. Mol. Model., 2025, 31, 180.

Ketkov

/ Кетков С. Ю./

Подпись

«_03_» июля 2026 г.

Верно.

Ученый секретарь ИМХ РАН

Кандидат химических наук

Шальнова

/ Шальнова К.Г./

Подпись

