

Выдвижение цикла работ Новикова Александра Сергеевича

«Компьютерное моделирование и теоретические исследования в органической, неорганической и металлоорганической химии: нековалентные взаимодействия, реакционная способность и катализ»

на соискание премии, присуждаемой Санкт-Петербургским государственным университетом за научные труды в 2021 году

(по категории: «За вклад в науку молодых исследователей»)

Цикл работ Новикова Александра Сергеевича в области квантовой химии и компьютерного моделирования «Компьютерное моделирование и теоретические исследования в органической, неорганической и металлоорганической химии: нековалентные взаимодействия, реакционная способность и катализ», выдвигаемый на соискание премии, присуждаемой Санкт-Петербургским государственным университетом за научные труды в 2021 году, выполнен на очень высоком уровне, а результаты опубликованы в самых авторитетных и престижных специализированных международных научных журналах (включая *Nat. Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Chem. Commun.*, *Chem. Eur. J.*, *Chem. Asian J.*, *RSC Catal. Sci. Tech.*, *Cryst. Growth Des.*, *CrystEngComm*, *Inorg. Chem.*, *J. Org. Chem.*, *Organometallics*, *Org. Biomol. Chem.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *Dalton Trans.* и др.).

Результаты, полученные в ходе исследований в рамках данного цикла работ, важны для биохимии (понимание природы фолдинга белков), медицины (синтез антибактериальных, противовирусных и противоопухолевых препаратов, меток для нейтрон-захватной терапии онкологических заболеваний), химической промышленности и технологии (катализ процессов кросс-сочетания, мультикомпонентных реакций и конверсии углеводородов), материаловедения (создание наукоёмких материалов, обладающих ценными окислительно-восстановительными, электронными, механическими, магнитными и оптическими свойствами, перспективными для изготовления светодиодов, фотоэлементов солнечных электростанций, пористых структур с развитой поверхностью, сенсоров, аккумуляторных элементов, жидких кристаллов).

Данный цикл работ вносит существенный вклад в развитие фундаментальных научных знаний в области органической, неорганической и металлоорганической химии, а также компьютерного моделирования.

Исследования в рамках данного цикла работ полностью соответствуют мировым научным стандартам, носят междисциплинарный характер, выполнены на стыке теоретической и экспериментальной химии, кристаллографии и наук о материалах.

У меня нет сомнений в том, что Новиков Александр Сергеевич является выдающимся специалистом в области квантовой химии и компьютерного моделирования, одним из наиболее перспективных молодых сотрудников СПбГУ, по крайней мере, в своей научной области, о чем дополнительно свидетельствуют такие его успехи и достижения, как:

- **исключительно высокие показатели публикационной активности** (Новиков Александр Сергеевич – автор более 210 статей в высокорейтинговых профильных международных научных журналах, включая *Nat. Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.* и *Angew. Chem. Int. Ed.* Девять из его публикаций были признаны редколлегиями журналов *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Chem. Eur. J.*, *J. Org. Chem.* (дважды), *Dalton Trans.*, *ACS Omega*, *Eur. J. Inorg. Chem.* (дважды) и *CrystEngComm* лучшими статьями выпуска, их пиктограммы размещены на обложках; его статьи в журналах *Nat. Commun.*, *Chem. Eur. J.*, *J. Org. Chem.*, *Eur. J. Inorg. Chem.*, *Eur. J. Org. Chem.*, *ChemPhysChem* и *Polymers* получали статусы “Editors’ Highlights”, “Hot Paper”, “Hot Topic: Gold collection”, “Featured Article”, “Very Important Paper” и “Editor’s Choice Article”)
- **победы в конкурсах и стипендиальных программах международного и национального уровней** (Новиков Александр Сергеевич – лауреат международной премии Европейской

академии для лучших молодых учёных России (2016 г.); призёр конкурса молодых учёных на соискание премии им. Ю. Т. Стручкова (2017 г.); лауреат конкурса молодежных научных работ имени выдающихся ученых ИОНХ РАН (конкурс имени академика Я. К. Сыркина за работы в области квантовой химии, теории строения молекул и химической связи, 2020 г.), многократный стипендиат программ Erasmus+ и FIRST+ в качестве преподавателя курсов по квантовой химии и компьютерному моделированию в высших учебных заведениях Швеции, Испании и Финляндии (2017–2021 гг.), многократный победитель конкурсов на участие НПР СПбГУ в программах межвузовского обмена, реализуемых в рамках соглашений СПбГУ с зарубежными вузами-партнёрами (2016–2020 гг. – Германия, Финляндия, Португалия). Выступления А. С. Новикова с докладами на многочисленных международных и всероссийских конференциях и симпозиумах неоднократно признавались лучшими и удостоивались почётных дипломов.)

- **социальная активность в области научно-организационной деятельности** (Новиков Александр Сергеевич является экспертом Российского научного фонда в области квантовой химии и компьютерного моделирования, а также по направлению «супрамолекулярная химия»; рецензентом в профильных международных и российских научных журналах: *The Journal of Organic Chemistry* (American Chemical Society), *Langmuir* (American Chemical Society), *Physical Chemistry Chemical Physics* (Royal Society of Chemistry), *CrystEngComm* (Royal Society of Chemistry), *New Journal of Chemistry* (Royal Society of Chemistry), *Chemistry – A European Journal* (John Wiley & Sons), *Journal of Computational Chemistry* (John Wiley & Sons), *Journal of Heterocyclic Chemistry* (John Wiley & Sons), *Molecules* (MDPI), *Crystals* (MDPI), *Materials* (MDPI), *Viruses* (MDPI), *International Journal of Molecular Sciences* (MDPI), *Inorganics* (MDPI), *Chemosensors* (MDPI), *Symmetry* (MDPI), *Mathematics* (MDPI), *Biology* (MDPI), *Entropy* (MDPI), *Processes* (MDPI), *Vaccines* (MDPI), *Nanomaterials* (MDPI), *Pharmaceuticals* (MDPI), *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials* (De Gruyter), *Current Organic Chemistry* (Bentham Science), *Frontiers in Chemistry* (Frontiers), *Coordination Chemistry Review* (Elsevier), *Applied Catalysis B: Environmental* (Elsevier), *International Journal of Hydrogen Energy* (Elsevier), *International Journal of Biological Macromolecules* (Elsevier), *Journal of Materials Research and Technology* (Elsevier), *Materials Letters* (Elsevier), *Food Chemistry* (Elsevier), *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* (Elsevier), *Inorganica Chimica Acta* (Elsevier), *Solid State Sciences* (Elsevier), *Journal of Solid State Chemistry* (Elsevier), *Diamond and Related Materials* (Elsevier), *Computational and Theoretical Chemistry* (Elsevier), *Materials Chemistry and Physics* (Elsevier), *Journal of Luminescence* (Elsevier), *Materials Today Communications* (Elsevier), *Chemical Physics Letters* (Elsevier), *Journal of Molecular Structure* (Elsevier), *Journal of Molecular Graphics and Modelling* (Elsevier), *Arabian Journal of Chemistry* (Elsevier), *Carbohydrate Research* (Elsevier), *Surfaces and Interfaces* (Elsevier), *Optik* (Elsevier), *Журнал неорганической химии*, *Успехи химии* и др. Во время проведения IX *International Chemistry Conference for Young Scientists “Mendeleev 2015”* (Санкт-Петербург, 7–10 апреля 2015 г.) он был председателем секции “Quantum Chemistry and Computer Modeling”, а также членом программного комитета; во время проведения кластера конференций по органической химии «*Оргхим-2016*» (Санкт-Петербург, Репино, 27 июня–1 июля 2016 г.) он входил в состав местного оргкомитета, а также в состав оргкомитета VI *Симпозиума по металлоорганической химии*; во время проведения X *Международной конференции молодых учёных по химии «Менделеев-2017»* (Санкт-Петербург, 4–7 апреля 2017 г.) он был председателем секции «Компьютерное моделирование» и членом организационного комитета; на VIII *Всероссийской школе-конференции молодых ученых с международным участием «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул»*, (Иваново, 24–26 апреля 2017 г.) он был пленарным докладчиком; во время проведения XXVII *Международной Чугаевской конференции по координационной химии* (Нижний Новгород, 2–6 октября 2017 г.) он был председателем молодёжной секции и членом организационного комитета; во время проведения кластера конференций по неорганической химии “*InorgChem 2018*” (Астрахань, 17–21 сентября 2018 г.) он был членом программного и организационного комитетов; он курировал визит финской делегации из University of Jyväskylä, Ювяскюля, Финляндия в Санкт-Петербургский

государственный университет в рамках Finnish–Russian student and teacher international exchange mobility program FIRST+ и был пленарным докладчиком (17–24 марта 2018 г.); он принимал участие в 1st *International Conference on Noncovalent Interactions* (Лиссабон, 2–6 сентября 2019 г.) в качестве приглашённого лектора; во время проведения *XI International Conference on Chemistry for Young Scientists “Mendeleev 2019”* (Санкт-Петербург, 9–13 сентября 2019 г.) он был председателем секции "Computer modeling and cheminformatics" и пленарным докладчиком; он принимал участие в *British Council sponsored workshop “Dynamic self-assembly and quorum effects in chemistry and biology predicted by non-linear modelling algorithms”* (Ливерпуль, Великобритания, 20–23 октября 2019 г.) в качестве приглашённого докладчика; он был членом международного программного комитета во время проведения 4th *International Symposium on Halogen Bonding* (Virtual event due to COVID-19 pandemic, Стелленбос, ЮАР, 2–5 ноября 2020 г.); во время проведения 12th *International Conference on Chemistry for Young Scientists “Mendeleev 2021”* (Санкт-Петербург, 6–10 сентября 2021 г.) он был председателем секции "Computer modeling and cheminformatics" и членом программного комитета. Кроме того, Новиков Александр Сергеевич активно участвует в работе редколлегии научных журналов и подготовке тематических выпусков: Guest Editor of the Special Issue “Non-covalent interactions in crystals” in *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials* (De Gruyter); Guest Editor of the Special Issue "Computational Insights into Industrial Chemistry" in *Computation* (MDPI); Guest Editor of the Special Issue “New Trends in King Saud University in Crystals” in *Crystals* (MDPI); Guest Editor of the Special Issue “Non-covalent Interactions in Coordination and Organometallic Chemistry” in *Crystals* (MDPI); Guest Editor of the Special Issue “Symmetry in Quantum and Computational Chemistry” in *Symmetry* (MDPI); Editorial Board Member in *Compounds* (MDPI); Editorial Board Member in *Computation* (MDPI): Computational Chemistry Section)

- **руководство грантами РФФИ и РНФ и участие в научной работе по многочисленным грантам РФФИ и РНФ в качестве исполнителя** (руководитель проекта РНФ [19-73-00001 (2019–2021)] и двух проектов РФФИ [16-33-60063 (2016–2018); 16-33-00212 (2016–2017)], участие в проектах РНФ [17-73-20185 (2017–2020), 14-43-00017(-P) (2014–2018)] и РФФИ [16-03-00441 (2016–2018); 18-33-00704 (2018–2019); 18-29-04006 (2018–2020); 20-33-70010 (2019–2021); 20-53-00006 (2020–2022)])
- **обширный опыт научной и преподавательской работы за рубежом** (University of Oviedo, Овьедо, Испания (научная группа Prof. Ángel Martín Pendás) – преподаватель курса “Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: catalysis, reactivity, and non-covalent interactions” для PhD и MSc студентов (2019 г.); Otto Schott Institute of Materials Research, Friedrich Schiller University Jena, Йена, Германия (научная группа Prof. Marek Sierka) – приглашённый исследователь (2019 г.); Uppsala University, Уппсала, Швеция (научная группа Prof. Kersti Hermansson) – преподаватель курса “Density functional theory calculations in organometallic and coordination chemistry: reactivity, catalysis, and non-covalent interactions” для PhD-студентов (2019 г.); University of Jyväskylä, Ювяскюля, Финляндия (научная группа Prof. M. Haukka) – приглашённый исследователь (2015 и 2017 гг.), преподаватель курсов “Quantum and Computational Chemistry”, “Materials modeling” и “Computer modeling in chemistry and materials science” для MSc- и PhD-студентов (2017, 2018, 2019 гг., соответственно); Biocenter Oulu и University of Oulu, Оулу, Финляндия (научная группа Dr. André H. Juffer) – приглашённый лектор на тему «Density functional theory calculations in organometallic and coordination chemistry: reactivity, catalysis, and non-covalent interactions» (2019 г.); Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, Лиссабон, Португалия (научная группа Prof. A.J.L. Pombeiro) – научный сотрудник (2011–2013 г.), постдок (2014 г.), приглашённый исследователь (2016 и 2017 гг.))

Резюмируя вышеизложенное, я считаю, что Новиков Александр Сергеевич достоин премии, присуждаемой Санкт-Петербургским государственным университетом за научные труды в 2021 году, и поддерживаю его кандидатуру в конкурсе.

Лауреат премии, присуждаемой Санкт-Петербургским государственным университетом за научные труды в 2013 году (по категории: «За вклад в науку молодых исследователей»), лучший выпускник Санкт-Петербургского государственного университета 2010 года, первый заместитель директора объединенного института химии Российского университета дружбы народов.

Цховребов Александр Георгиевич

