

Сведения об оппоненте

по диссертации Кадцына Евгения Дмитриевича на тему «Исследование водных растворов неэлектролитов методом молекулярной динамики» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Фамилия Имя Отчество	Федотова Марина Витальевна
Ученая степень, шифр и название специальности (которые были получены при защите), ученое звание	доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, профессор
Основное место работы (полное и сокращенное наименование организации в соответствии с уставом), почтовый адрес	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН)
Должность, подразделение	главный научный сотрудник лаборатории 1-2 «ЯМР-спектроскопия и численные методы исследования жидких систем»
Почтовый адрес оппонента	153045, Россия, Ивановская область, Иваново, ул. Академическая, 1
Телефон	+7 910 9882246
Адрес электронной почты	hebrus@mail.ru

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

1. Fedotova M. V., Kruchinin S. E., Chuev G.N. Hydration Structure of Osmolyte TMAO: Concentration- / Pressure-induced Response, *New J. Chem.* 2017. V. 41. P. 1219-1228.
2. Dmitrieva O.A., Fedotova M.V., Buchner R. Evidence for Cooperative Na⁺ and Cl⁻ Binding by Strongly Hydrated Proline, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2017. V. 19. P. 20474-20483.
3. Fedotova M.V., Kruchinin S.E. Hydration and Ion-Binding of Glycine Betaine: How They May Be Involved into Protection of Proteins under Abiotic Stresses, *J. Mol. Liq.* 2017. V. 244. P. 489–498.
4. Fedotova M. V., Kruchinin S. E., Chuev G.N. Local Ion Hydration Structure in Aqueous Imidazolium-Based Ionic Liquids: The Effects of Concentration and Anion Nature, *J. Mol. Liq.* 2017. V. 247. P. 100–108.
5. Shaukat S., Fedotova M. V., Kruchinin S. E., Bešter-Rogac M., Podlipnik C., Buchner, R. Hydration and ion association of aqueous choline chloride and chlorocholine chloride, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, V. 21, P. 10970-10980.
6. Fedotova M. V. Compatible Osmolytes - Bioprotectants: Is there a common link between their hydration and their protective action under abiotic stresses? *J. Mol. Liq.*, 2019, V. 292, P. 111339 (1-15).
7. Fedotova M.V., Kruchinin S.E., Chuev G.N. Features of local ordering of biocompatible ionic liquids: The case of choline-based amino acid ionic liquids, *J. Mol. Liq.*, 2019.
8. M.V. Fedotova, S.E. Kruchinin, G.N. Chuev, Hydration features of the neurotransmitter acetylcholine, *J. Mol. Liq.* 304 (2020) 112757(1-8).
9. M.V. Fedotova, S.E. Kruchinin, G.N. Chuev, Molecular insight on ion hydration and association in aqueous choline chloride solutions, *J. Mol. Liq.* 313 (2020) 113563(1-8).
10. Chuev G.N., Fedotova M.V., Valiev M., Chemical bond effects in classical site density functional theory of inhomogeneous molecular liquids, *J. Chem. Phys.* (2020) 152, 041101(1-6);
11. Friesen S., Fedotova M.V., Kruchinin S.E., Buchner R. Hydration and dynamics of L-glutamate ion in aqueous solution, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2021) 2021, 23, 1590- 1600

12. Chuev G.N., Fedotova M.V., Valiev M. Renormalized site density functional theory // Journal of Statistical Mechanics - Theory and Experiment. 2021, V. 2021, 033205
13. Chuev G.N., Fedotova M.V., Valiev M. Renormalized site density functional theory for models of ion hydration, J. Chem. Phys. **155**, 064501 (2021);
14. Kruchinin S.E., Fedotova M.V. Ion Pairing of the Neurotransmitters Acetylcholine and Glutamate in Aqueous Solutions, J. Phys. Chem. B 2021, 125, 11219–11231
15. S. Friesen, M. V. Fedotova, S. E. Kruchinin, Marija Bester-Rogac, C. Podlipnik, and R. Buchner, Hydration and counterion binding of aqueous acetylcholine chloride and carbamoylcholine chloride, Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, 23, 25086–25096

Федотова

/ Федотова М.В /

Подпись

«_8_» апреля 2022 г.

Верно.

Ученый секретарь ИХР РАН

Иванов

/К.В. Иванов /

