

Телефон городской: (843)273-22-83

Комната №: 236

Email: katsyuba@iopc.ru

Область научных исследований Колебательные и электронные спектры, квантовая химия, моделирование, структура, внутри- и межмолекулярные взаимодействия, органические, элемент- и металлоорганические соединения, ионные жидкости.

Информация

Кацюба Сергей Александрович - ведущий научный сотрудник ИОФХ.

В 1974 г. окончил физический факультет Казанского Государственного Университета. В 1980 г. защитил кандидатскую диссертацию: «Колебательные спектры, поворотная изомерия и силовые постоянные некоторых фосфорорганических соединений» (специальность - оптика), а в 2001 г. - докторскую: «Колебательные спектры и строение органических соединений трех- и четырехкоординированного фосфора» (специальность – физическая химия). Работает в ИОФХ с 1980 г. Является автором более 100 публикаций.

Публикации

1. E.E.Zvereva, A.R.Shagidullin, S.A.Katsyuba. Ab initio and DFT predictions of infrared intensities and Raman activities. // J. Phys. Chem. A, 2011. – V. 115. – P. 63-69.
2. T. P. Gerasimova, S. A. Katsyuba. Bipyridine and phenanthroline IR-spectral bands as indicators of metal spin state in hexacoordinated complexes of Fe(II), Ni(II) and Co(II). // Dalton Trans., 2013. – V. 42. – P. 1787 – 1797.
3. S. A. Katsyuba, E. E. Zvereva, T. I. Burganov. Is there a simple way to reliable simulations of infrared spectra of organic compounds? // J. Phys. Chem. A, 2013. – V. 117. – P. 6664-6670
4. T.P. Gerasimova, S.A. Katsyuba. Infrared and Raman bands of cyclopentadienyl ligands as indicators of electronic configuration of metal centers in metallocenes // J. Organomet. Chem., 2015. –V. 776. – P.30–34.
5. S.A. Katsyuba, M.V. Vener, E.E. Zvereva, Z. Fei, R. Scopelliti, J.G. Brandenburg, S. Siankevich, P.J. Dyson. Quantification of Conventional and Nonconventional Charge-Assisted Hydrogen Bonds in the Condensed and Gas Phases // J. Phys. Chem. Lett. –2015. –Vol.6. –N.21. –P.4431–4436.
6. E.E. Zvereva, S.A. Katsyuba, P.J. Dyson, A.V. Aleksandrov. Leaching from palladium nanoparticles in an ionic liquid leads to the formation of ionic monometallic species // J. Phys. Chem. Lett. – 2017. – V. 8. – P.3452 -3456.
7. T. I. Burganov, N. A. Zhukova, V. A. Mamedov, C. Bannwarth, S. Grimme, S. A. Katsyuba. Benzimidazolequinoxalines: Novel Fluorophores with Tuneable Sensitivity to Solvent Effects // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. – V. 19. – P. 6095-6104