



## PUBLICATIONS

14. Tiwari, V; Korol, R; Franco\*, I Robust Purely Optical Signatures of Floquet States in Laser-Dressed Crystals. *Phys. Rev. Lett.* **2025**, 135 (18), 186901. DOI: [10.1103/5ywx-7dbs](https://doi.org/10.1103/5ywx-7dbs)
13. Korol\*, R; Chen, X; Franco\*, I High-Frequency Tails in Spectral Densities. *J. Phys. Chem. A* **2025**, 129 (15), 3587-3596. DOI: [10.1021/acs.jpca.5c00943](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c00943)
12. Turner\*, A C; Korol, R; Bill, M; Stolper, D A Stable isotope equilibria in the dihydrogen-water-methane-ethane-propane system. Part 2: Experimental determination of hydrogen isotopic equilibrium for ethane-H<sub>2</sub> from 30 to 200 °C and propane-H<sub>2</sub> from 75 to 200 °C. *Geochim. Cosmochim. Acta* **2025**, 396, 91-106. DOI: [10.1016/j.gca.2025.02.033](https://doi.org/10.1016/j.gca.2025.02.033)
11. Korol\*, R; Turner, A C; Nandi, A; Bowman, J M; Goddard, W A; Stolper, D A Stable isotope equilibria in the dihydrogen-water-methane-ethane-propane system. Part 1: Path-integral calculations with CCSD(T) quality potentials. *Geochim. Cosmochim. Acta* **2025**, 396, 71-90. DOI: [10.1016/j.gca.2025.02.028](https://doi.org/10.1016/j.gca.2025.02.028)
10. Turner, A C; Korol, R; Eldridge, D L; Bill, M; Conrad, M E; Miller, T F; Stolper\*, D A Experimental and theoretical determinations of hydrogen isotopic equilibrium in the system CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O from 3 to 200 °C. *Geochim. Cosmochim. Acta* **2021**, 314, 223-269. DOI: [10.1016/j.gca.2021.04.026](https://doi.org/10.1016/j.gca.2021.04.026)
9. Korol, R; Rosa-Raíces, J L; Bou-Rabee, N; Miller\*, T F Dimension-free path-integral molecular dynamics without preconditioning. *J. Chem. Phys.* **2020**, 152 (10), 104102. DOI: [10.1063/1.5134810](https://doi.org/10.1063/1.5134810)
8. Eldridge, D L; Korol, R; Lloyd, M K; Turner, A C; Webb, M A; Miller, T F; Stolper\*, D A Comparison of Experimental vs Theoretical Abundances of <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>D and <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>D<sub>2</sub> for Isotopically Equilibrated Systems from 1 to 500 °C. *ACS Earth Space Chem.* **2019**, 3 (12), 2747-2764. DOI: [10.1021/acsearthspacechem.9b00244](https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.9b00244)
7. Korol, R; Bou-Rabee, N; Miller\*, T F Cayley modification for strongly stable path-integral and ring-polymer molecular dynamics. *J. Chem. Phys.* **2019**, 151 (12), 124103. DOI: [10.1063/1.5120282](https://doi.org/10.1063/1.5120282)
6. Korol, R; Segal\*, D Machine Learning Prediction of DNA Charge Transport. *J. Phys. Chem. B* **2019**, 123 (13), 2801-2811. DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b12557](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b12557)
5. Korol, R; Segal\*, D From Exhaustive Simulations to Key Principles in DNA Nanoelectronics. *J. Phys. Chem. C* **2018**, 122 (8), 4206-4216. DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b12744](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b12744)
4. Korol, R; Kilgour, M; Segal\*, D ProbeZT: Simulation of transport coefficients of molecular electronic junctions under environmental effects using Büttiker's probes. *Comput. Phys. Commun.* **2018**, 224, 396-404. DOI: [10.1016/j.cpc.2017.10.005](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.10.005)
3. Korol, R; Kilgour, M; Segal\*, D Thermopower of molecular junctions: Tunneling to hopping crossover in DNA. *J. Chem. Phys.* **2016**, 145 (22), 224702. DOI: [10.1063/1.4971167](https://doi.org/10.1063/1.4971167)
2. Longobardi, L E; Zatsepin, P; Korol, R; Liu, L; Grimme, S; Stephan\*, D W Reactions of Boron-Derived Radicals with Nucleophiles. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 139 (1), 426-435. DOI: [10.1021/jacs.6b11190](https://doi.org/10.1021/jacs.6b11190)
1. Korol\*, R V; Yanchuk, O M; Marchuk, O V; Orlov, V F; Moroz, I A; Vyshnevskiy, O A Size Stabilizers in Two-electrode Synthesis of ZnO Nanorods. *Phys. Chem. Solid St.* **2021**, 22 (2), 380-387. DOI: [10.15330/pcss.22.2.380-387](https://doi.org/10.15330/pcss.22.2.380-387)

---

PRÉSENTATIONS ET PRIX	Séminaire CERMM, Université Concordia, Montréal, Québec <u>Présentation invitée</u> : “Effets quantiques dans les systèmes complexes”	2026
	Série “Lunch and Learn”, Département de chimie, Université de Sherbrooke, Québec Présentation : “Effets quantiques dans les systèmes complexes”	2026
	Séminaire CCQS au département de physique, Université de Rochester, Rochester, New York Présentation : “How NOT to build control-target gates in semiconductor quantum dots and beyond”	2025
	Série de séminaires d’été sur la science de l’information quantique moléculaire Présentation : “Opening quantum dynamics on gate-defined quantum dots with RLC circuits”	2025
	Conférence de Rochester <a href="#">sur la cohérence et la science quantique</a> , Rochester, New York Affiche : “Hybrid singlet-triplet qubits enable fault-tolerant single-pulse CNOT gate”	2025
	Conférence américaine <a href="#">sur la chimie théorique</a> , Chapel Hill, North Carolina Affiche : “Analog Simulation of Open Quantum Dynamics”	2024
	Conférence <a href="#">Gray-Hill</a> à l’Occidental College, Los Angeles, California. <u>Conférence primée</u> : “A window to Earth’s past with the help of theoretical chemistry”	2023
	Congrès et exposition <a href="#">canadiens de chimie</a> , Calgary, Canada Communication orale : “Accurate quantum statistics from improved path-integrals in imaginary time”	2022
	Mini-colloque sur la <a href="#">science moléculaire</a> , Montreal, Canada Affiche : “Dimension-free ring-polymer molecular dynamics”	2022
	Réunion de printemps de l’ <a href="#">ACS</a> , San Diego, California Affiche : “Accurate quantum statistics from improved path-integrals in imaginary time”	2022
	Séminaire des sciences géologiques et planétaires à Caltech, Pasadena, California <u>Conférence invitée</u> : “ $D$ and $^{13}C$ exchange equilibria using Path-Integral Monte-Carlo”	2022
	Réunion de mécanique statistique de <a href="#">Berkeley</a> Affiche : “Cayley modification for strongly stable path-integral molecular dynamics”	2020
	Conférence CECAM sur l’électronique <a href="#">biomoléculaire</a> , Madrid, Spain Affiche : “Principles of Charge Transport in DNA: from extensive simulations to neural networks”	2018
	28 <sup>e</sup> Symposium <a href="#">canadien</a> sur la chimie théorique et computationnelle, Windsor, Canada <u>Prix de la meilleure affiche</u> : “Charge transport in DNA: From comprehensive simulations to key principles”	2018
	100 <sup>e</sup> Congrès <a href="#">canadien de chimie</a> , Toronto, Canada <u>Prix de la meilleure affiche</u> : “Tunneling to Hopping Crossover in Thermopower of DNA Molecular Junctions”	2017
	Symposium de <a href="#">biophysique chimique</a> , Toronto, Canada Communication orale : “DNA Molecular Junctions: Tunneling to Hopping Crossover”	2017
	<a href="#">33<sup>rd</sup> Symposium</a> de physique chimique, Waterloo, Canada Communication orale : “Probing mechanisms of charge transport in DNA with Landauer-Büttiker formalism”	2017
	45 <sup>e</sup> Conférence de chimie des étudiants de premier cycle du Sud de l’ <a href="#">Ontario</a> , Toronto, Canada <u>1<sup>er</sup> prix (présentation)</u> : “Tunneling to Hopping Crossover in DNA & DNA-like molecular junctions”	2017

SERVICE	Comité des études supérieures du département (CESD)	2026–présent <sup>4</sup>
	Comités de suivi d'étudiants (3 étudiants)	2026–présent
	Représentant étudiant au comité consultatif du département de chimie	2016–2017
	Représentant de 2 <sup>e</sup> année à l'association des étudiants en chimie	2016–2017
	Membre du conseil d'administration du groupe étudiant <i>Chemistry Connections</i>	2015–2016
ADHÉSIONS	Société canadienne de chimie (SCC)	
	Centre de recherche en modélisation moléculaire (CERMM)	
	Centre d'études des matériaux avancés pour les piles et systèmes de stockage d'énergie renouvelable de l'Université de Sherbrooke (CÉMAPROVUS)	

---

BÉNÉVOLAT ET INITIATIVES COMMUNAUTAIRES	Direction et coordination de l'envoi de fournitures humanitaires en Ukraine depuis le campus de Caltech et au-delà	2022–2023
	Bénévole pour l'organisation à but non lucratif <a href="#">Nova Ukraine</a> , Stanford, California	2021–2023
	Développement web, établissement et coordination du partenariat avec <i>Teach for Ukraine</i>	
	Bénévole pour l'organisation à but non lucratif <a href="#">Teach for Ukraine</a> , Kyiv, Ukraine	2021–2022
	Recrutement et entrevue des enseignants candidats à l'étape de l'entrevue à distance	
	Responsable de l' <a href="#">orientation</a> des étudiants internationaux	2019, 2020
	Mentor ("grand frère") pour les nouveaux étudiants aux cycles supérieurs à Caltech	2019, 2020
	Bénévole pour le programme de sensibilisation scientifique via <a href="#">Caltech Y</a>	2018–2020
	Tutorat au secondaire avec l'OBNL <a href="#">CAUSE Tutoring</a>	2018–2019
	Tuteur pour le groupe de tutorat par les pairs de l'Université de Toronto	2015–2018
ENSEIGNEMENT	<i>Développement de cours</i> : Laboratoires de chimie computationnelle, Chem3 à Caltech	2022
	Accent sur les relations structure-fonction et les dangers des approximations.	
	Enseignant au secondaire, Rotman Arts and Science School, Vaughan, Canada	2020–2022
	Programme académique, Chimie 11 <sup>e</sup> et 12 <sup>e</sup> année, Sciences 10 <sup>e</sup> année.	
	Un étudiant s'est classé 3 <sup>e</sup> à Vaughan, dans le top 200 au Canada au concours de chimie <a href="#">Avogadro</a>	
	Entraîneur pour les Olympiades internationales de chimie	
	Équipe nationale canadienne (4 étudiants) – 2 médailles de bronze, 1 d'argent	Printemps 2018
	Équipe nationale ukrainienne (1 étudiant) – médaille de bronze	Printemps 2014
	Tutorat privé en chimie, physique et mathématiques	2014–2018
	Élèves du secondaire : acceptés à l'University College (R.-U.), l'Université Columbia (É.-U.) et autres	
	École d'été de biologie chimique, Loutsk, Ukraine	Été 2015
	Conception de problèmes et d'expériences pour aider les lycéens à maîtriser les concepts clés de la chimie	
ÉVALUATION PAR LES PAIRS	Revue ACS : ACS Physical Chemistry Au	
	Revue APS : Physical Review Letters, Physical Review A, B, E et Research	
	Revue Elsevier : Organic Geochemistry, Chemical Geology	
	Revue RSC : Physical chemistry chemical physics	
	Revue Wiley : Rapid communications in mass spectrometry	

---

ÉCOLES D'ÉTÉ ET ATELIERS	Atelier sur la dynamique en <a href="#">phase condensée</a> au <a href="#">TSRC</a> (Virtuel)	2020
	École de chimie <a href="#">théorique</a> au <a href="#">TSRC</a> , Telluride, Colorado	2019
	Institut Weizmann des Sciences, Rehovot, Israël Boursier <a href="#">Kupcinet-Getz</a> au <a href="#">laboratoire Rubtchinski</a>	2015
EXPÉRIENCE PROFESSIONNELLE ANTÉRIEURE	Enseignant au secondaire, Rotman Arts and Science School, Vaughan, Canada	2020–2022
	Assistant de recherche, Département de linguistique, Université de Toronto Projet sur la variation et le changement des langues <a href="#">d'origine</a>	2016–2018
LOISIRS	Escalade, haltérophilie	depuis 2014
	Guitare, basse	depuis 2012
	Danse folklorique ukrainienne	depuis 2004
LANGUES	Maîtrise de l'ukrainien, de l'anglais & du russe	
LANGAGES INFORMATIQUES	Python, C++, MATLAB, FORTRAN, Mathematica, Bash; Développement web (PHP & django, HTML, CSS, JS)	