

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m_0 v^2}{\hbar^2}\right)\psi(x) = \beta.$$
 что это уравнение для ψ при больших x и др. Вспомог. Точка. $U(x) \rightarrow$ по др. Вспомог. в $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ и $\psi \rightarrow$ по др. Вспомог. в $\omega^{(1)} \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x}$.
 \rightarrow по др. Вспомог. в $\frac{U'(x)}{2x} = \frac{m_0 v^2}{\hbar^2} \frac{1}{2x} = \frac{m_0 v^2}{\hbar^2} \frac{1}{2x}$
 уравнение примет вид $\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \beta^2 \psi(x) = 0$.
 . решение в нотациональном виде. $U(x)$:

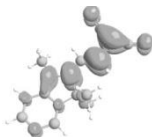
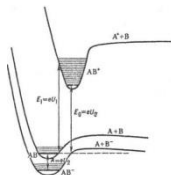
$$\frac{U'(x)}{2x} + U(x) = E = \text{const} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{U'(x)}{2x} = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(x))$$
 или Вспомог. стационарные волновые функции. Величина (квантованная) n с Вспомог. имеет вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(x))\right)\psi(x) = \beta.$$
 Вспомог. на трёхмерном пространстве:

$$\left(\Delta + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(\vec{r}))\right)\psi(\vec{r}) = \beta,$$

$$\Delta = (\nabla^2), \quad \nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right).$$
 и еще размышлите. Стационарные уравнения.



Посвящается памяти профессора К.С. Краснова

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет»
 ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»
 ФГБОУ ВО «Ярославский государственный университет им. П.Г.Демидова»
 Российская Академия Наук
 ФГБУН «Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН»



ПРОГРАММА
X Всероссийской молодежной
школы-конференции
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ:
СТРУКТУРА И РЕАКЦИОННАЯ
СПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ И
НЕОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Иваново, 23-25 марта 2022 г.

Организационный и программный комитет

Сопредседатели:

Клюев М.В., д-р. хим. наук, ИвГУ (Иваново)

Гиричев Г.В., д-р. хим. наук, ИГХТУ (Иваново)

Ученые секретари:

Волкова Т.Г., канд. хим. наук., ИвГУ (Иваново)

Белова Н.В., д-р. хим. наук, ИГХТУ (Иваново)

Члены:

Бутман М.Ф., д.х.н., ИГХТУ (Иваново)

Гиричева Н.И., д.х.н. ИвГУ (Иваново)

Гордина Н.Е., ректор ИГХТУ (Иваново)

Киселев М.Г., д.х.н., ИХР РАН (Иваново)

Кудин Л.С., д.х.н., ИГХТУ (Иваново)

Малыгин А.А., ректор ИвГУ (Иваново)

Мамардашвили Н.Ж., д.х.н., ИХР РАН (Иваново)

Марфин Ю.С., проректор ИГХТУ (Иваново)

Плисс Е.М., д.х.н., ЯрГУ (Ярославль)

Русakov А.И., ректор ЯрГУ (Ярославль)

Соломоник В.Г., д.х.н., ИГХТУ (Иваново)

23 марта 2022 г., среда

1 корпус ИвГУ (ул. Ермака, 37/7, Точка кипения ИвГУ)

9⁰⁰ – 10⁰⁰ – **Регистрация участников**

10⁰⁰**Открытие школы-конференции.**

Слово о профессоре К.С. Краснове.

10³⁰ - 12⁰⁰**Пленарные лекции**

Батаев В.А., канд.хим.наук (Химический факультет МГУ им.М.В. Ломоносова)

«ОШИБКИ ПРОСТЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ В ОПИСАНИИ МНОГОМОДОВОГО ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ С ПЛОСКИМИ ЦИКЛАМИ»

Барташевич Е.В., д-р хим.наук (ФГАОУ ВО "ЮУрГУ"(НИУ))

«СИСТЕМАТИЗАЦИЯ НЕКОВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ ПО ДОНОРАМ ЭЛЕКТРОФИЛЬНЫХ САЙТОВ»

12⁰⁰ – 12¹⁵ **Перерыв**

12¹⁵ - 13⁰⁰ **Пленарные лекции**

Боченкова А. В., канд.физ-мат.наук (Химический факультет МГУ им.М.В. Ломоносова)

«КВАНТОВАЯ ХИМИЯ ХРОМОФОРНЫХ ГРУПП ФОТОРЕЦЕПТОРНЫХ БЕЛКОВ»

13⁰⁰ – 14⁰⁰ **Обед**

14⁰⁰ - 17³⁰ **Доклады молодых ученых**

1. Абсалямов Д.З., Витковская Н.М

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ N-ФЕНИЛ-3-ВИНИЛ-4-ЭТИЛПИРРОЛА ИЗ АНИЛИНА И АЦЕТИЛЕНА В СУПЕРОСНОВНОЙ СРЕДЕ KOBu^t/DMSO

- 2. Благоев М.А., Спицына Н.Г., Крапивин В.Б., Симонов С.В.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ
НЕЙТРАЛЬНОГО БИЯДЕРНОГО КОМПЛЕКСА Fe(III)
- 3. Бородин О.С., Овчинникова И.Г., Федорова О.В.,
Барташевич Е.В.**
ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ПОДАНДОВ В ПРЕДРЕАКЦИОННЫХ
КОМПЛЕКСАХ НА СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ
БИДЖИНЕЛЛИ
- 4. Засимов П.В., Тюрин Д.А., Рязанцев С.В., Фельдман В.И.**
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
КАТИОН-РАДИКАЛА $H_2C_3O^+$
- 5. Жулидин П.А., Филин П.Д., Пластун И.Л.**
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ БЕЛКОВОЙ СТРУКТУРЫ
ЦИТОКИНА TNF С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ДИНАМИКИ
- 6. Козленко А.С., Коваль В.В., Пугачев А.Д., Ожогин И.В.,
Макарова Н.И., Лукьянов Б.С.**
ОСОБЕННОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ ИЗОМЕРИЗАЦИИ В
ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПОЛОЖЕНИЯ СОПРЯЖЕННОГО
КАТИОННОГО ФРАГМЕНТА В МОЛЕКУЛАХ СПИРОПИРАНОВ
- 7. Курочкин И.Ю., Ольшевская В.А., Зайцев А.В., Гиричев Г.В.**
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ 5,10,15,20-
ТЕТРА(ФЕНИЛ/ПЕРФТОРФЕНИЛ)-ПОРФИРИНАТОВ
ПЛАТИНЫ(II)
- 8. Наумов А.А., Пластун И.Л.**
АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АМИНОКИСЛОТ ИЗ СОСТАВА БЕЛКОВЫХ
СТРУКТУР TNF И ИММУНОГЛОБУЛИНА В ХОДЕ МЕЧЕНИЯ
КРАСИТЕЛЕМ ЦИАНИНОМ 7
- 9. Наваркин И.С., Васильев О.А., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г.**
СИЛЬНЫЕ ЭФФЕКТЫ И ПСЕВДОЭФФЕКТЫ ЯНА-ТЕЛЛЕРА В
НИЗШИХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ МОЛЕКУЛЫ
ТЕТРАФТОРИДА ТАНТАЛА

10. Романовская Ю.А., Пичугина Д.А.
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ
МЕТАНА НА ОКСИДЕ ВАНАДИЯ

11. Рыжов И.В., Ерошин А.В., Финогенов Д.Н., Жабанов Ю.А.
СТРОЕНИЕ, СИНТЕЗ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
КОМПЛЕКСА ОКТАХЛОРЗАМЕЩЕННОГО
ПИРАЗИНОПОРФИРАЗИНА С ГАЛЛИЕМ

12. Шеховцов Н.А., Бушуев М.Б.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭМИССИИ
СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ 1-ГИДРОКСИ-1*H*-ИМИДАЗОЛА,
ДЕМОНСТРИРУЮЩЕГО ФОТОПЕРЕНОС ПРОТОНА

13. Стёпин С.С., Батаев В.А., Годунов И.А.
СТРОЕНИЕ И КОНФОРМАЦИОННАЯ ДИНАМИКА МОЛЕКУЛЫ
ЦИКЛОБУТАНКАРБАЛЬДЕГИДА

14. Козинская Л., Мирхамитова Д.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ВИНИЛИРОВАНИЯ
4',4''- ДИНИТРОЗОДИБЕНЗО-18-КРАУН-6 ПО РЕАКЦИИ
ГРИНЬЯРА- БАРТОЛИ

15. Крапивин В.Б., Лужков В.Б., Санина Н.А.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ РЕАКЦИЙ РАСПАДА
ТИОФОРМАЛЬДЕГИДНОГО ДИНИТРОЗИЛЬНОГО КОМПЛЕКСА
ЖЕЛЕЗА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

24 марта 2022 г., четверг

1 корпус ИвГУ (ул.Ермака, 37/7, Точка кипения ИвГУ)

10⁰⁰– 11³⁰ **Пленарные лекции**

Орлов В. Ю., д-р хим.наук (ЯрГУ им.П.Г. Демидова)
«ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ НОВЫХ
МЕДИЦИНСКИХ МАТЕРИАЛОВ»

Цирельсон В.Г., д-р физ.-мат.наук (РХТУ им. Д.И. Менделеева)
«СОВРЕМЕННАЯ ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ: ЧТО
НОВОГО?»

11³⁰ – 11⁴⁵ Перерыв

11⁴⁵– 12³⁰ Пленарные лекции

Шестаков А.Ф., д-р хим.наук(ИПХФ РАН)

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ, ОПТИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ С ПОЛИДЕНТАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ

12³⁰ – 13³⁰ Обед

13³⁰–16⁰⁰ Доклады молодых ученых

1. Бандурист П.С., Пичугина Д.А

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКТИВАЦИИ МЕТАНА НА ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ КЛАСТЕРАХ МЕДИ, ДОПИРОВАННЫХ НИКЕЛЕМ

2. Тулибаева Г.З., Хатмуллина К.Г., Ярмоленко О.В.,

Шестаков А.Ф.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕДОКС-ПРОЦЕССОВ В КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРАХ $MS_2C_2N_2H_2$, ГДЕ $M = Cu, Ni$

3. Вьялкин Д.А., Жабанов Ю.А., Казарян К.Ю., Тихомирова Т.В

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И КОНФОРМАЦИОННЫЙ СОСТАВ ЗАМЕЩЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ФТАЛОЦИАНИНА С АЛЮМИНИЕМ И ЦИНКОМ

4. Зубарев А.А., Орел В.Б.

МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ 1-АЗАДИЕНОВ ИЗ N-ФЕНИЛБЕНЗАЛЬДИМИНА И ФЕНИЛАЦЕТИЛЕНА В СРЕДЕ $Co^IV/DMSO$, КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

5. Никитенко Н.Г., Шестаков А.Ф.

АКТИВНЫЕ ЦЕНТРЫ ДЛЯ ОКИСЛЕНИЯ МЕТАНА, ОБРАЗОВАННЫЕ ПРИ РАЗЛОЖЕНИИ H_2O_2 В ПРИСУТСТВИИ НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ГЛУТАТИОНОМ

6. Донец А.В.

ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ ГИДРАТАЦИИ АНИОНОВ Cl^- В КРОВИ ЧЕЛОВЕКА

7. Межова Е.В., Григоричева Э.К., Скитневская А.Д., Трофимов А.Б.

ИЗУЧЕНИЕ ВИБРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КАТИОН-РАДИКАЛЕ 1,1-ДИХЛОРЕТИЛЕНА

8. Смирнов А.В., Диниахметова Д.Р., Колесов С.В.

НАЧАЛЬНАЯ СТАДИЯ РАДИКАЛЬНО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АЛЛИЛХЛОРИДА В ПРИСУТСТВИИ ФЕРРОЦЕНА

9. Бабков Л.М., Ивлиева (Перетокина) И.В., Мещерякова А.А., Сорокин В.В.

УСТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-СТРУКТУРНЫХ ПРИЗНАКОВ КОМПОНЕНТ СМЕСИ ХРОМЕНОПИРИДИНКАРБОНИТРИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДОМ ТФП

10. Самульцев Д.О., Семенов В.А., Кривдин Л.Б.

ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНЫЕ РЕЛЯТИВИСТСКИЕ РАСЧЕТЫ КОНСТАНТ ЭКРАНИРОВАНИЯ И ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ЯМР ПЕНТААММИНАКВАКОМПЛЕКСОВ КОБАЛЬТА, РОДИЯ И ИРИДИЯ

11. Филин П.Д., Жулидин П.А., Пластун И.Л.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ ФЛАГЕЛЛИНА С ИОНАМИ ЦИНКА

16⁰⁰ – 18⁰⁰ Стендовая сессия

1. Акимов Г.А., Степин С.С., Батаев В.А., Годунов И.А.

ОСОБЕННОСТИ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛАХ С ЦИКЛОПРОПАНОВЫМ КОЛЬЦОМ

2. Аликулова И.М., Волкова Т.Г., Таланова И.О.

ОСОБЕННОСТИ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ O··H-O В ГИДРОКСИЛСОДЕРЖАЩИХ АМИНОКИСЛОТАХ

3. Бойченко И. В., Писарев С. А., Палюлин В. А.

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ 3,7-(ОКСА/ТИА)-ДИГЕТЕРОАНАЛОГОВ БИЦИКЛО[3.3.1]НОНАНА

4. Бумбина Н.В., Акопова О.Б., Жарникова Н.В., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗ МЕЗОМОРФИЗМА
ПРОИЗВОДНЫХ ПИРОМЕЛЛИТОВОЙ КИСЛОТЫ С
ФРАГМЕНТАМИ ОКСАДИАЗОЛА

5. Викторчук Н.А., Белова Н.В., Слизнев В.В.

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНОГО
КОМПЛЕКСА 4-МЕТИЛПИРИДИН-N-ОКСИДА С ТРИФТОРИДОМ
БОРА

6. Вирзум Л.В., Крылов Е.Н.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
СУЛЬФАНИЛИДОВ И КАРБОАНГИДРАЗЫ E. Coli

7. Двойникова А.В., Кочетова Л.Б., Кустова Т.П.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА
РЕАКЦИИ БЕНЗГИДРАЗИДА С 4-
МЕТИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОНИЛХЛОРИДОМ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

8. Жабанов Ю.А., Гиричева Н.И.

УЛУЧШЕНИЕ ПОДХОДОВ К АВТОМАТИЧЕСКОЙ ГЕНЕРАЦИИ
НАБОРОВ ЕСТЕСТВЕННЫХ КООРДИНАТ, НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ
РЕШЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

9. Жарникова Н.В., Акопова О.Б., Бумбина Н.В., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.

ПРИМЕНИМОСТЬ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ
ДЛЯ ПРОГНОЗА МЕЗОМОРФИЗМА У ЗВЕЗДООБРАЗНЫХ
ТРИСТРИАЗОЛОТРИАЗИНОВ

10. Заборщикова П.Е., Кочетова Л.Б., Кустова Т.П.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА
РЕАКЦИИ БЕНЗОЛСУЛЬФОГИДРАЗИДА С 3-
НИТРОБЕНЗОЛСУЛЬФОНИЛХЛОРИДОМ
В РАСТВОРИТЕЛЯХ, СОДЕРЖАЩИХ ВОДУ

11. Калашян А.Р., Орлов В.Ю.

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЗОМЕТИЛИЛИДОВ
С СИСТЕМОЙ π -СВЯЗЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

12. Козлов С.В., Пазюк Е.А.
ВОЗБУЖДЁННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ РАДИКАЛА ОН:
НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

13. Krylov E. N., Virzum L. V.
QUANTUM CHEMICAL DESCRIPTORS OF THE INHIBITION
PROCESS OF α -CARBONIC ANHYDRASE BY SULFONAMIDES

14. Курочкин И.Ю., Гиричев Г.В.
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ
1,2-ДИОКСОФЕНИЛЭТАНА

**15. Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И., Сахарова Е.А., Смирнова А.И.,
Усольцева Н.В.**
КОНФОРМЕРЫ 3,4-ДИБУТОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ КАК
ТЕРМИНАЛЬНЫЕ ФРАГМЕНТЫ ПОЛИКАТЕНАРНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ

16. Лапыкина Е.А., Федоров М.С., Мурадалиева И.Р.
ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ВОДОРОДСВЯЗАННЫХ
КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ 4,4'- *ТРАНС* -
СТИЛЬБЕНДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

17. Магдалинова Н.А., Шарова К.А., Клюев М.В.
МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА ФТАЛОЦИАНИНОВ НИКЕЛЯ И
КОБАЛЬТА ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

**18. Одинцова Е.Г., Кириллова А.М., Болвинова Д.А., Богдан К.В.,
Петренко В.Е., Богдан Т.В.**
РАДИКАЛЫ И ДИМЕРЫ КОНИФЕРИЛОВОГО СПИРТА: РАСЧЕТ
ЭНЕРГИИ СВЯЗЫВАНИЯ И ПОСТРОЕНИЕ КАРТ
МОЛЕКУЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА
МЕТОДОМ DFT

19. Павловский В.В., Порсев В. В., Эварестов Р. А., Туник С.П.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ
ТРИПЛЕТ-ТРИПЛЕТНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В ДИАДЕ
ИРИДИЕВОГО КОМПЛЕКСА С РОДАМИНОМ В

- 20. Петров В.М., Нухова Э.Т.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ
КОНФОРМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ ТРИФТОРМЕТИЛАМИДА
2-ОКСО-1,2-ДИГИДРО-БЕНЗО[СD]ИНДОЛ-6-СУЛЬФОНОВОЙ
КИСЛОТЫ
- 21. Наваркин И.С., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г.**
АВІНІТІО ТЕРМОХІМІЯ МОЛЕКУЛ ТЕТРАФТОРИДОВ
ВАНАДИЯ, НИОБИЯ И ТАНТАЛА
- 22. Старостин Р.О., Фрейдзон А.Я., Громов С.П.**
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И
ФОТОФИЗИКИ ГОМОЛОГИЧЕСКОЙ СЕРИИ
БИС(АРИЛИДЕН)ЦИКЛОАЛКАНОНОВ
- 23. Федоров М.С., Филиппов И.А., Гиричева Н.И., Лебедев И.А.,
Смирнова А.И., Усольцева Н.В.**
ВОДОРОДСВЯЗАННЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДИСКОТИЧЕСКИХ И
КАЛАМИТНЫХ МЕЗОГЕНОВ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ С УЧЕТОМ ДИСПЕРСИОННОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
- 24. Филиппов А.А., Федоров М.С.**
КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА И ЦИС-ТРАНС
ИЗОМЕРИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ 4-ФЕНИЛАЗОБЕНЗОЙНОЙ
КИСЛОТЫ И 4-ФЕНИЛАЗОФЕНОЛА
- 25. Финашкин Д.С., Бабков Л.М.**
СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ Н-КОМПЛЕКСОВ
ДИГИДРОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ
- 26. Щетинкина М.А., Бородин О.С., Баргашевич Е.В., Королёва
М.А., Краснов В.П.**
ПОИСК СТЕРЕОДИФФЕРЕНЦИРУЮЩИХ ФАКТОРОВ
АЦИЛИРОВАНИЯ 2-МЕТИЛПИПЕРИДИНА ОРТО-ЗАМЕЩЕННЫХ
ПИПЕРИДИНОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ
- 27. Яковлева А.И., Федоров М.С.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВОДОРОДСВЯЗАННЫХ КОМПЛЕКСОВ 3,4,5-
ТРИМЕТОКСИКОРИЧНОЙ КИСЛОТЫ С АНИЗОТРОПНЫМИ
ПРОИЗВОДНЫМИ ПИРИДИНА

28. Бабков Л.М., Москвитин М.Д., Давыдова Н.А., Баран Я.
ПОСТРОЕНИЕ СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКОЙ
АНГАРМОНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК
СПЕКТРА 2-БЕНЗИЛФЕНОЛА

25 марта 2022 г., пятница

1 корпус ИвГУ (ул.Ермака, 37/7, Точка кипения ИвГУ)

10⁰⁰ – 11³⁰ Пленарные лекции

Венер М.В., д-р.физ.-мат.наук (ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН)
**«ЭНЕРГИЯ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ
МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В
ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ. РАСЧЕТЫ МЕТОДОМ
КОНА-ШЕМА С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ
УСЛОВИЯМИ»**

Пименов О.А., канд.хим.наук (ИГХТУ)
**«АНАЛИЗ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В
РАМКАХ ТЕОРИИ БЕЙДЕРА QTAIM»**

11³⁰ – 11⁴⁵ Перерыв

11⁴⁵–16⁰⁰ Доклады молодых ученых

**1. Власова Ю. С., Полынский М. В., Бондаренко А.А.,
Анаников В.П.**

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОНО- И
ОЛИГОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИОНОВ ПАЛЛАДИЯ И МЕДИ
В МАСС-СПЕКТРАХ РАСТВОРОВ

2. Дунаев А.М., Говоров Д.Н., Моталов В.Б.
ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ КАТИОНОВ АЛКИЛИМИДАЗОЛИЯ

3. Ерошин А.В., Отлётгов А.А., Коптяев А.И., Жабанов Ю.А.
СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СОСТАВ ПАРА ТЕТРАБЕНЗОПОРФИРИНА
И ЕГО КОМПЛЕКСА С ЦИНКОМ

4. Егназарян К.Т., Шамснев Р.С., Флид В.Р.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕГИО- И
СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТИ РЕАКЦИИ АЛЛИЛИРОВАНИЯ
НОРБОРНАДИЕНА В ПРИСУТСТВИИ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ

5. Исляйкин М.К.
ПОРФИРИНОИДЫ. СТРОЕНИЕ И АРОМАТИЧНОСТЬ

6. Мухина В.А., Ерошин А.В., Шлыков С.А.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ 1-
ХЛОРСИЛАТРАНА

7. Мощенков А.Д., Отлётов А.А., Кавалло Л., Миненков Ю.В.
РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ КОНФОРМАЦИЙ СОЕДИНЕНИЙ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ОТКРЫТЫМИ ОБОЛОЧКАМИ

8. Пластун И.Л., Захаров А.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И
ПОЛИМОРФИЗМА ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ
ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

9. Отлётов А.А., Мощенков А.Д., Кавалло Л., Миненков Ю.В.
КОНФОРМАЦИОННЫЕ ЭНЕРГИИ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ
МЕТАЛЛОВ С ОТКРЫТЫМИ ОБОЛОЧКАМИ ИЗ СОВРЕМЕННЫХ
МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

10. Семенов В.А., Кривдин Л.Б.
ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ЗСЛ ПРОТЕАЗЫ
SARS-COV-2 МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА

11. Яблоков М.Е., Иванов А.М., Стельмах Н.М., Федорова И.В.
КЛАСТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ГИДРОСУЛЬФАТ ЭТИЛАММОНИЯ НА
ОСНОВЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

16⁰⁰ Заккрытие школы-конференции, подведение итогов