

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»

При финансовой поддержке



*Российского фонда
фундаментальных
исследований*

ПРОГРАММА

IX Всероссийской молодежной школы-конференции

***КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ: СТРУКТУРА
И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ
И НЕОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ***

Посвящается памяти профессора К.С. Краснова

Иваново, 19-23 ноября 2018 г.

Организационный и программный комитет

Сопредседатели:

Клюев М.В., д.х.н., ИвГУ (Иваново)

Гиричев Г.В., д.х.н., зав. каф. физики ИГХТУ (Иваново)

Ученые секретари:

Волкова Т.Г., к.х.н., ИвГУ (Иваново)

Белова Н.В., д.х.н., ИГХТУ (Иваново)

Члены:

Бутман М.Ф., д.ф.-м. н., ректор ИГХТУ (Иваново)

Гиричева Н.И., д.х.н. ИвГУ (Иваново)

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

Колкер А.М., д.х.н., ИХР РАН (Иваново)

Кудин Л.С., д.х.н., ИГХТУ (Иваново)

Орлов В.Ю., д.х.н., ЯрГУ (Ярославль)

Русаков А.И., д.х.н., ректор ЯрГУ (Ярославль)

Румянцев Е.В., д.х.н., ректор ИГПУ (Иваново)

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

Сырбу Св.А., д.х.н., проректор ИвГУ (Иваново)

19 ноября 2018 г., понедельник

1 корпус ИвГУ (ул.Ермака, 37/7, актовЫй зал)

9⁰⁰ – 10³⁰ – **Регистрация участников**

10³⁰ **Открытие школы-конференции.**

Слово о профессоре К.С. Краснове.

Приветственный концерт юных музыкантов

11⁰⁰ - 12⁰⁰ **Пленарные лекции**

М.В. Венер, д-р физ-мат. наук (РХТУ им.Менделеева)

Взаимосвязь между низкочастотными колебаниями и подвижностью зарядов в монокристаллах 7,7,8,8-тетрацианохинодиметана (TCNQ) и его фтор замещенных производных

12⁰⁰ – 12¹⁵ **Перерыв**

12¹⁵ - 13⁰⁰ **Пленарные лекции**

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

Ошибки квантово-химических расчетов: реальные и мнимые

13⁰⁰ – 14⁰⁰ **Обед**

14⁰⁰ - 17³⁰ Доклады молодых ученых

1. Авдошин А.А., Наумов В.С., Игнатов С.К.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КООРДИНАЦИИ ОЛИГОМЕРОВ ХИТОЗАНА С ИНСУЛИНОМ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

2. Шиляева Е.А., Новаковская Ю.В.

ВОЗМОЖНЫЕ ДЕФЕКТЫ В СТРУКТУРЕ ОКСИДА ГРАФИТА

3. Чернова Е.М., Бубнова К.Е., Гиричева Н.И.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ СИСТЕМ С МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЙ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ

4. Усольцев С.Д., Шагурин А.Ю.

ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ПЕРВОГО ПРЕДСТАВИТЕЛЯ ФЛУОРОФОРОВ КЛАССА RODIPY

5. Чиркина Е.А., Корчевин Н.А., Кривдин Л.Б.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 1,2-ЭТАНДИТИОЛА С 1,3-ДИХЛОПРОПЕНОМ И 1,3-ДИХЛОРБУТЕНОМ-2

6. Голосная М.Н., Никитина Н.А., Пичугина Д.А., Кузьменко Н.Е.

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА V-Ti КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ПРОПАНА

Перерыв

7. Логинова А.С., Савинцева Л.А., Игнатов С.К.

СТРУКТУРА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРОВ Au_n (n=2 -19). КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

8. Грибанькова А. А., Белоглазов С. М., Гурченко В. В.,

Кесарь Э. Р., Ларина В. В., Агиевич М. А.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ДИБЕНЗО- И ФЕНОТИАЗИНА В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ СТАЛИ

9. Рабдано С.О., Чижик В.И.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КЛАСТЕРОВ «КАТИОН – ГИДРАТНЫЙ СЛОЙ – АНИОН» ДЛЯ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ИМИДАЗОЛА

10. Самульцев Д.О., Семенов В.А., Русаков Ю.Ю., Русакова И.Л., Федоров С.В., Кривдин Л.Б.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ЯМР ^{15}N И ^{31}P АЗОЛОВ, ФОСФОЛОВ И ФОСФАЗОЛОВ: НАИБОЛЬШАЯ ТОЧНОСТЬ ПРИ НАИМЕНЬШИХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАТРАТАХ

11. Лебедев И.С., Бубнова К.Е., Гиричева Н.И., Фёдоров М.С., Филиппов И.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ АЗОБЕНЗОЛА И п-н-ПРОПИЛОКСИКОРИЧНОЙ КИСЛОТЫ

20 ноября 2018 г., вторник

1 корпус ИвГУ (ул.Ермака, 37/7, актовый зал)

9⁰⁰ – 11³⁰ **Пленарные лекции**

Туровцев В.В., д-р физ-мат. наук, (Тверской государственный медицинский университет)
"Квантовая механика и квантовая химия. Взаимосвязь и противоречия"

Шестаков А.Ф., д-р хим. наук (ИПХФ РАН)
Строение и электронная структура комплексов металлов с макроциклическими лигандами в восстановленном состоянии

11³⁰ – 12⁰⁰ **Перерыв**

12⁰⁰ – 12⁴⁵ **Пленарные лекции**

Пазюк Е. А.
Молекулярная спектроскопия «возмущенных» состояний

13⁰⁰ – 14⁰⁰ **Обед**

14⁰⁰ - 17³⁰ **Доклады молодых ученых**

1. Сучкова Т.А., Филимонова М.А., Дорофеева О.В.
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИЗОДЕСМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ СОГЛАСОВАННОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ АДАМАНТАНА И МОЧЕВИНЫ

2. Семенов В.А., Самульцев Д.О.
РАЗРАБОТКА РЕЛЯТИВИСТСКОЙ МЕТОДОЛОГИИ РАСЧЕТА КОНСТАНТ ЭКРАНИРОВАНИЯ ЯМР ^{15}N НА ПРИМЕРЕ АММИАКАТНЫХ ПЛАТИНАТОВ

3. Денисик М.Г., Матулис В.Э.
СТАНДАРТНЫЕ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛА И ТРИАЗОЛОВ.
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

4. Сергеева Г.А., Крылов Е.Н., Вирзум Л.В.
КИСЛОТНОСТЬ АРИЛСУЛЬФОНИЛАМИДОВ КАК ФУНКЦИЯ ПАРАМЕТРОВ КИСЛОТНОГО ЦЕНТРА – АТОМА СУЛЬФАМИДНОГО АЗОТА

5. Жигулин Г.Ю.
ВЛИЯНИЕ ЦЕНТРАЛЬНОГО КАТИОНА НА ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛИЯДЕРНЫХ АМИНОГИДРОКСИМАТНЫХ МЕТАЛЛАМАКРОЦИКЛОВ МЕДИ И РЗЭ

6. Туровцев В.В., Каплунов И.А., Орлов Ю.Д.
ТОЧНЫЙ УЧЕТ ВКЛАДА ОДНОМЕРНОГО ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ В ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

Перерыв

7. Киндер М.М., Бабков Л.М., Безродная Т.В., Гаврилко Т.А.
КВАНТОВЫЕ РАСЧЁТЫ СТРУКТУРЫ И ИК СПЕКТРОВ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИСОПРЯЖЁННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

8. Бубнова К.Е., Гиричева Н.И., Малышева А.В., Гиричев Г.В.
ВЛИЯНИЕ ДЛИНЫ УГЛЕВОДОРОДНОГО РАДИКАЛА НА
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ
ДИМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ АЛКИЛОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ

9. Соловьев А.И., Плюснин В.Ф., Шубин А.А.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ
ИНТЕРМЕДИАТОВ ФОТОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ
СЕРОСОДЕРЖАЩИХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ И РУТЕНИЯ

10. Пластун И.Л., Бокарев А.Н.
ВОЗМОЖНОСТИ ПОВЫШЕНИЯ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОЙ
АКТИВНОСТИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ ЗА СЧЁТ
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С
МОДИФИЦИРОВАННЫМИ НАНОАЛМАЗАМИ

11. Пулин В.Ф., Сурина Т. Ю., Рыжова Е. В.
СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
ГАЛОИДОЗАМЕЩЁННЫХ ПАРАФИНОВЫХ И НЕПРЕДЕЛЬНЫХ
УГЛЕВОДОРОДОВ

21 ноября 2018 г., среда

1 корпус ИвГУ (ул.Ермака, 37/7, актовый зал)

9⁰⁰ – 11³⁰ Пленарные лекции

Годунов И.А., д-р хим. наук (Химический факультет МГУ им. М.В.
Ломоносова)
*Особенности конформационного анализа молекул в возбуждённых
электронных состояниях*

Соловьев М.Е., д-р физ-мат.наук (ЯрГУ им. П.Г. Демидова)
*Квантово-химическое моделирование влияния среды на реакции
окисления 1,2-замещенных этилена*

11³⁰ – 12⁰⁰ Перерыв

12⁰⁰ – 12⁴⁵ Пленарные лекции

Орлов В.Ю., д-р хим. наук (ЯрГУ им. П.Г. Демидова)

*Квантово-химическое моделирование при разработке новых
лекарственных средств*

13⁰⁰ – 14⁰⁰ Обед

14⁰⁰ – 16⁰⁰ Доклады молодых ученых

1. Киселёв А.Н., Курочкин И.Ю., Отлётов А.А., Погонин А.Е.
СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ 5,10,15,20-ТЕТРАКИС(4'-
ФТОРФЕНИЛ)ПОРФИНА СОГЛАСНО РЕЗУЛЬТАТАМ КВАНТОВО-
ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

**2. Смирнова А.А., Матвеев П.И., Митрофанов А.А., Жохов С.С.,
Петров В.Г., Устынюк Ю.А., Калмыков С.Н.**
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОДУКТОВ
ГАММА-РАДИОЛИЗА ЭКСТРАГЕНТОВ F-ЭЛЕМЕНТОВ

3. Кильдюшова С.С., Крылов Е.Н., Вирзум Л.В.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИОННОЙ
СПОСОБНОСТИ АРИЛСУЛЬФОНИЛФТАЛИМИДОВ В РЕАКЦИИ
С АЛИФАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

**4. Федоров М.С., Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И., Суворова О.А.,
Кораблева М.С., Первухина Н.В.**
СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ
ПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИНА

5. Рагойжа Е.Г., Матулис В.Э., О.А. Ивашкевич
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ 5-ПОЛИВИНИЛТЕТРАЗОЛЯТА
МЕДИ(II) И ПРОДУКТА ЕГО ТЕРМОЛИЗА

17⁰⁰ – 19⁰⁰ Стендовая сессия (Внимание! Проводится в ИГХТУ)

1. Бойцов Д.Е., Воронин А.П., Манин А.Н.

СРАСРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЭНЕРГИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ СУЛЬФАНИЛАМИДА ОТНОСИТЕЛЬНО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ЭНТАЛЬПИИ СУБЛИМАЦИИ

2. Болотова У.А., Люткин А.С., Орлов В.Ю., Цивов А.В.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГЕТЕРОАТОМНЫХ ФЕНОЛОВ С ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫМИ БЕНЗОЛАМИ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

3. Бочаров П.С., Ксенофонов А.А., Антина Е.В.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ $\text{VO}(\text{DIPY})$ С БЫЧЬИМ СЫВОРОТОЧНЫМ АЛЬБУМИНОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗ МЕЗОМОРФИЗМА ПОЛИКАТЕНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ АЗОГРУППУ И ФРАГМЕНТ ГАЛЛОВОЙ КИСЛОТЫ

5. Вирзум Л.В., Крылов Е.Н.

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ НУКЛЕОФИЛЬНОСТЬ ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРИДИН-ОКСИДОВ КАК ФУНКЦИЯ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ АТОМА КИСЛОРОДА

6. Волкова Т.Г., Таланова И.О.

ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ α -АМИНО- β -ПАРАОКСИФЕНИЛПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ

7. Гиричева М.А., Гуцин А.В.

ОСОБЕННОСТИ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ СУРЬМЫ И ВИСМУТА С САЛИЦИЛОВОЙ И АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТАМИ

8. Голованов И.С., Сухоруков А.Ю.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ЦИКЛОТРИМЕРИЗАЦИИ ОКСИМОВ

9. Грязева (Соколова) Т.Д., Люткин А.С., Орлов В.Ю., Цивов А.В.
ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ДИАРИЛОВЫХ ЭФИРОВ В РЕАКЦИЯХ $\text{S}_\text{N}\text{Ar}$ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

10. Гурина Д.Л., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е.
АВ ИНИТЮ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ П-КУМАРОВОЙ, СИРЕНЕВОЙ И ГАЛЛОВОЙ КИСЛОТ В СРЕДЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

11. Ершова А.О., Федоров М.С.

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГАЗОФАЗНОГО ДЕПРОТОНИРОВАНИЯ АМИНОЗАМЕЩЕННЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ СУЛЬФОКИСЛОТ

12. Захаров С.В., Авдошин А.А., Наумов В.С., Игнатов С.К.
ДИФфуЗИОННЫЕ СВОЙСТВА АМОРФНОГО ПОЛИЛАКТИДА. МОЛЕКУЛЯРНО- ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

13. Иванова К.А., Комендантова А.С., Менчиков Л.Г., Волкова Ю.А., Заварзин И.В.

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ ПИРИДАЗИНОВ ИЗ β -ХЛОРВИНИЛАЛЬДЕГИДОВ И ТИОГИДРАЗИДОВ ОКСАМИНОВЫХ КИСЛОТ

14. Игнатова А.В., Иванов С.Н., Федоров М.С.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТОНОДОНОРНЫХ СВОЙСТВ ДИКАРБОНОВЫХ И ДИСУЛЬФОНОВЫХ КИСЛОТ БЕНЗОЛА

15. Калмыков П.А., Лысенко А.А., Магдалинова Н.А., Ключев М.В.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИИ МОЛЕКУЛЫ CS_2 НА КЛАСТЕРЕ Pd_{13}

16. Котова В.Е., Королькова К.А., Белова Н.В., Пименов О.А.
СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ ПИРАЗОЛОНАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ТЕРБИЯ И НЕОДИМА ПО РЕЗУЛЬТАТАМ DFT РАСЧЁТОВ

- 17. Крылов Е.Н.**
ПОЗИЦИОННАЯ СЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ
НУКЛЕОФИЛЬНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ АНИОНА АЦЕТОНА К
1-МЕТОКСИАЛЛЕНУ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ
- 18. Ксенофонтов А.А., Бочаров П.С., Ангина Е.В.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ
БИС(ДИПИРРОМЕТЕНАТОВ) ЦИНКА(II) С ФУРОСЕМИДОМ
- 19. Кузнецова А.С., Исляйкин М.К.**
ИЗУЧЕНИЕ ИЗОМЕРОВ КАМФОРАЗАМЕЩЕННОГО
ДИТРИАЗОЛДИИЗОИНДОЛМАКРОГЕТЕРОЦИКЛА МЕТОДОМ
DFT
- 20. Кузнецова А.С., Исляйкин М.К.**
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ
ДИКАРБАГЕМИПОРФИРАЗИНА С КАМФОРАПИРАЗИНОВЫМИ
ФРАГМЕНТАМИ ПО ДАННЫМ МЕТОДА DFT
- 21. Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Гурина Д.Л., Тихонов Н.С.,
Петренко В.Е**
СЕЛЕКТИВНАЯ СОЛЬВАТАЦИЯ ИЗОМЕРОВ ГИДРОКСИ- И
ДИГИДРОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТ В МОДИФИЦИРОВАННОМ
СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА. ЧИСЛЕННЫЙ
ЭКСПЕРИМЕНТ
- 22. Отлёттов А.А., Киселев А.Н., Курочкин И.Ю., Погонин А.Е.**
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ПЕРИФЕРИЙНОГО ГАЛОГЕНА-
ЗАМЕСТИТЕЛЯ НА АРОМАТИЧНОСТЬ 5,10,15,20-ТЕТРАКИС(4'-
ГАЛОГЕНФЕНИЛ)ПОРФИНА
- 23. Отлёттов А.А., Веретенников В.В., Мерлян А.П., Жабанов Ю.А.**
МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И АРОМАТИЧНОСТЬ
ТИАДИАЗОЛ-АННЕЛИРОВАННОГО ГЕМИГЕКСАФИРАЗИНА И
ГЕТЕРОАЗАПОРФИРИНОИДА
- 24. Пименов О.А., Бергер Р.И.Ф., Слизнев В.В.**
ПРИМЕРЫ МЕТАЛЛОФИЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В
ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

- 25. Погонин А.Е., Курочкин И.Ю., Отлёттов А.А., Киселёв А.Н.**
ОСОБЕННОСТИ ИК-СПЕКТРОВ 5,10,15,20-ТЕТРАКИС(4'-
ГАЛОГЕНФЕНИЛ)ПОРФИНОВ
- 26. Пыхова А.Д., Иоффе И.Н.**
СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА CF_2 -
ПРОИЗВОДНЫХ ЭНДОЭДРАЛЬНОГО ФУЛЛЕРЕНА $Sc_3N@C_{80}$
- 27. Разрядов А.А., Кузнецова А.С., Исляйкин М.К.**
ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ 2,15(16)-
БИС(МЕТОКСИЭТОКСИ)ДИКАРБАГЕМИПОРФИРАЗИНОВ
ПО ДАННЫМ МЕТОДА DFT
- 28. Солдатова К.М., Гиричева Н.И., Смирнова А.И., Усольцева
Н.В.**
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ СМЕШАННО-
ЗАМЕЩЕННЫХ ПОРФИРИНОВ A_3B -ТИПА
- 29. Сорокина М.С., Соловьев М.Е.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИСОЕДИНЕНИЯ КИСЛОРОДА К АЛКИЛЬНЫМ РАДИКАЛАМ
ОКТАДИЕНА И МЕТИЛЛИНОЛЕАТА
- 30. Сулейманова Д.С., Кочетова Л.Б.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА
ГАЗОФАЗНОЙ РЕАКЦИИ ГЛИЦИЛГЛИЦИНА С
БЕНЗОЛСУЛЬФОНИЛХЛОРИДОМ
- 31. Троицкая Д.Е., Кочетова Л.Б., Кустова Т.П.**
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА
РЕАКЦИИ АРЕНСУЛЬФОНИЛИРОВАНИЯ ВТОРИЧНЫХ
ЖИРНОАРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ
- 32. Тулибаева Г.З., Ярмоленко О.В., Шестаков А.Ф.**
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИИ КРАУН-
ЭФИРОВ РАЗЛИЧНОЙ СТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ
УГЛЕРОДА

33. Тюнина В.В., Дунаев А.М.
МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ
ПИРИДИНКАРБОНОВАЯ КИСЛОТА – МЕТИОНИН ПО ДАННЫМ
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

34. Федорова И.В., Крестьянинов М.А., Сафонова Л.П.
AB INITIO ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ И УСТОЙЧИВОСТИ
РАЗЛИЧНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ
АЛКИЛАММОНИЕЕВОГО КАТИОНА

35. Федорова И.В., Сафонова Л.П.
АНАЛИЗ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ПРИ
ИЗУЧЕНИИ СТРУКТУРНЫХ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ИОННЫХ ПАР С КАТИОНОМ
ТРИЭТАНОЛАММОНИЯ

36. Tran Dinh Phien, Shlykov S. A.
MOLECULAR STRUCTURE OF 1-PHENYL-1-RO-
SILACYCLOHEXANES (R=H, CH₃) BY GAS-PHASE ELECTRON
DIFFRACTION AND THEORETICAL CALCULATIONS

37. Филиппова Я.Е., Иванов Е.Н., Исляйкин М.К.
ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ЗАМЕЩЕННОГО
МОНОЙОДГЕМИГЕКСАФИРАЗИНА АВАВАВ'-ТИПА ПО
ДАННЫМ МЕТОДА DFT

38. Чичерин К.А., Волкова Т.Г.
ВАЛЕНТНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ N-H СВЯЗИ В
3,5 – ДИМЕТИЛПИРАЗОЛЕ

22 ноября 2018 г., четверг

1 корпус ИвГУ (ул.Ермака, 37/7, актовЫй зал)

9⁰⁰ – 11³⁰ Пленарные лекции

Е.В. Баргашевич, д-р. хим. наук (ЮУрГУ)

*Принцип электрофильного сайта в обозначении галогенных,
никтогенных, халькогенных или тетрельных связей*

А.В. Столяров, д-р физ-мат. наук (Химический факультет МГУ)
*Роль квантовохимического моделирования в астрохимических
исследованиях*

11³⁰ – 12⁰⁰ Перерыв

12⁰⁰– 13⁰⁰ Доклады молодых ученых

1. Малеев А.А., Бухвалова С.Ю., Федоров А.Ю., Игнатов С.К.
ОЦЕНКА АНТИМИТОТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ АНАЛОГОВ КОЛХИЦИНА
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА

2. Мухитдинова С.Э., Баргашевич Е.В.
ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ И ПОТЕНЦИАЛ
ДЕЙСТВУЮЩИЙ НА ЭЛЕКТРОН В МОЛЕКУЛЕ В ОПИСАНИИ
ХАЛЬКОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСАХ

3. Новоселова А.А, Алисова И.В., Гусев К.А., Маймистов Д.Н.
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПОЛУЧЕНИЯ
АКТИВНЫХ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ ПРИ
ПРОЕКТИРОВАНИИ УСТАНОВОК ДЛЯ МИКРОРЕАКТОРНОГО
СИНТЕЗА

13⁰⁰ – 14⁰⁰ Обед

14⁰⁰– 16⁰⁰ Доклады молодых ученых

4. Отлётгов А.А., Вишнеvский Ю.В., Гиричев Г.В.
МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ АЦЕНАФТЕНА ПО ДАННЫМ
МЕТОДА ГАЗОВОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ, МИКРОВОЛНОВОЙ
СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

5. Родионова Е.В., Томилин О.Б., Фомина Л.В., Родин Е.А.
ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВАЛЕНТНЫХ
ИЗОМЕРОВ БЕНЗОЛА

6. Сакулина В.О., Бегунов Р.С., Соколов А.А., Величенко В.Е.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОРИЕНТАЦИИ РЕАКЦИИ
 S_EAR В ПИРИДО[1,2-А]БЕНЗИМИДАЗОЛАХ

7. Ксенофонтов А.А., Бичан Н.Г., Антина Е.В.
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОВАЛЕНТНЫХ
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ
БИС(ДИПИРРОМЕТЕНАТА) ЦИНКА(II) С ФУЛЛЕРЕНОМ

8. Ваганова С.В., Крылов Е.Н., Вирзум Л.В.
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ПОЛИМЕТИЛБЕНЗОЛОВ ПРИ
БРОМИРОВАНИИ В СРЕДЕ $AcOH$ КАК ФУНКЦИЯ
ОТНОСИТЕЛЬНОЙ НУКЛЕОФИЛЬНОСТИ

16⁰⁰ **Закрытие школы-конференции, подведение итогов,
награждение авторов лучших устных и стендовых докладов**

23 ноября 2018 г., пятница

Экскурсия в пос. Палех в новый музейно-выставочный комплекс