

XI Всероссийская молодежная школа-конференция

**Квантово-химические расчеты: структура и  
реакционная способность органических и  
неорганических молекул**



**Программа конференции**

г. Иваново, ФГБОУ ВО "Ивановский государственный химико-технологический  
университет"

11 ноября 2024 г. – 15 ноября 2024 г.

**Сопредседатели школы-конференции:**

1. Гиричев Георгий Васильевич, доктор химических наук, ИГХТУ (Иваново)
2. Ключев Михаил Васильевич, доктор химических наук, ИвГУ (Иваново)

**Ученые секретари:**

1. Белова Наталья Витальевна, доктор химических наук, ИГХТУ (Иваново)
2. Волкова Татьяна Геннадьевна, кандидат химических наук, ИвГУ (Иваново)

**Программный комитет:**

1. Барташевич Екатерина Владимировна, доктор химических наук, ЮУрГУ (Челябинск)
2. Батаев Вадим Альбертович, кандидат химических наук, МГУ им. М.В. Ломоносова (Москва)
3. Гиричева Нина Ивановна, доктор химических наук, ИвГУ (Иваново)
4. Гордина Наталья Евгеньевна, доктор технических наук, ректор ИГХТУ (Иваново)
5. Гущин Андрей Андреевич, доктор химических наук, ИГХТУ (Иваново)
6. Киселев Михаил Григорьевич, доктор химических наук, директор ИХР РАН (Иваново)
7. Малыгин Алексей Александрович, кандидат педагогических наук, ректор ИвГУ (Иваново)
8. Мамардашвили Нугзар Жораевич, доктор химических наук, ИХР РАН (Иваново)
9. Орлов Владимир Юрьевич, доктор химических наук, ЯрГУ (Ярославль)
10. Соломоник Виктор Геннадьевич, доктор химических наук, ИГХТУ (Иваново)
11. Цирельсон Владимир Григорьевич, доктор физико-математических наук, РХТУ им. Д.И. Менделеева (Москва)
12. Шлыков Сергей Александрович, доктор химических наук, ИГХТУ (Иваново)

**Организационный комитет:**

**Председатель:** Жабанов Юрий Александрович, доктор химических наук, ИГХТУ (Иваново)

1. Вьялкин Дмитрий Александрович, ИГХТУ (Иваново)
2. Ерошин Алексей Валерьевич, ИГХТУ (Иваново)
3. Князева Алина Алексеевна, ИГХТУ (Иваново)
4. Кузьмин Илья Алексеевич, ИГХТУ (Иваново)
5. Курочкин Иван Юрьевич, кандидат химических наук, ИГХТУ (Иваново)
6. Лебедев Иван Сергеевич, ИГХТУ (Иваново)
7. Петрова Ульяна Артемовна, ИГХТУ (Иваново)
8. Пименов Олег Александрович, кандидат химических наук, ИГХТУ (Иваново)
9. Погонин Александр Евгеньевич, кандидат химических наук, ИГХТУ (Иваново)

Все заседания будут проходить в аудитории Г203 Главного корпуса ИГХТУ (Шереметевский проспект, д. 7). Об изменениях в расписании будет сообщено заранее.

### **11 ноября, понедельник**

День приезда иногородних участников

### **12 ноября, вторник**

8:30 – 14:00 Регистрация участников

9:50 Открытие школы

10:00 – 11:20 Пленарные лекции

1. Пименов О.А. (ИГХТУ, Иваново) От механики до химии — шаг длиною в квант
2. Боченкова А.В. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Квантовая фотохимия биомолекулярных систем при линейном и нелинейном возбуждении

11:20 – 11:40 Кофе-брейк

11:40 – 13:00 Пленарные лекции

3. Жиляев П.А. (Сколковский институт науки и технологий, Москва) Применение искусственных нейронных сетей для разработки обменно-корреляционных функционалов в теории функционала плотности
4. Таюпов М.М., Пшеничнюк С.А., Асфандиаров Н.Л., Комолов А.С. (Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа) Механизмы образования и эволюции отрицательных ионов. Квантово-химические расчеты и эксперимент

13:00 – 14:00 Обед

14:00 – 16:00 Устные доклады

1. Стёпин С.С., Батаев В.А. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Влияние формы поверхностей потенциальной и кинетической энергии на внутреннее вращение в молекулах некоторых замещенных циклопропанов
2. Тепляшин Н.В., Бобков А.С., Витковская Н.М. (ИрИХ СО РАН, Иркутск) Квантовохимическое моделирование механизма сборки пирроло[1,2-а]пирозин-N-оксидов из N-алленилпиррол-2-карбальдегидов и гидроксилamina
3. Турченко П. Д., Скрипников Л. В. (Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург) Поправка на колебательные частоты к молекулярному параметру, характеризующему ядерно-спин-зависимые эффекты, нарушающие пространственную чётность в катионе  $^{29}\text{Si}^{16}\text{O}^+$
4. Петрова У.А., Князева А.А., Завалишин М.Н., Ерошин А.В., Жабанов Ю.А. (ИГХТУ, Иваново) Геометрическое строение и спектральные свойства пиридоксаль-5'-фосфат 1Н-тетразолил-5-гидразона и его комплексов с ионами Cd(II) и Ga(III)

5. Балхаева К.С. (Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева, Астрахань) Квантово-химическое изучение структуры и анализ биохимической активности дифениламинхлорарсина

6. Кликушин А.С., Доронин М.М., Мулина О.М., Медведев М.Г., Терентьев А.О. (ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва) Квантово-химическое изучение процесса димеризации иминовых радикалов

7. Руденко М.А., Елисеев А.А., Митрофанов А.А. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Разработка полуэмпирического метода расчета КИЭ для реакций протонного обмена

8. Гамов Г.А., Пименов О.А. (ИГХТУ, Иваново) Комплексы золота(III) с гидразонами витамина B6 и ароматических карбогидразидов: строение и электронные спектры по данным квантовохимических расчетов

16:00 – 16:20 Кофе-Брейк

16:20 – 18:00 Устные доклады

1. Ерошин А.В., Шлыков С.А. (ИГХТУ, Иваново) Конформационное разнообразие производных пиперидина

2. Жулидин П.А., Филин П.Д., Пластун И.Л. (СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов) Анализ межмолекулярного взаимодействия янтарной кислоты и никотинамида методом теории функционала плотности

3. Терехина Е.Н., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е. (ИвГУ, Иваново) Молекулярный взгляд на образование комплексов включения между  $\beta$ -циклодекстрином и хелидоновой кислотой

4. Никифорова С.О., Кованова М.А., Кузьмина И.А. (ИГХТУ, Иваново) Взаимное влияние краун-кольца и бензо-групп на структурные характеристики и зарядовое распределение в молекулах эфиров 18-краун-6, бензо-18-краун-6 и дибензо-18-краун-6

5. Бетехтин А.А. (Университет ИТМО, Санкт-Петербург) Изучение механизма присоединения  $\text{TMSCl}$  к тиохромомам с помощью методов вычислительной химии

6. Евсеев Г.С., Крючкова Н.А., Викулова Е.С. (Новосибирский государственный университет, Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск) Диамин-ацетилацетонатные комплексы дивалентных металлов: квантово-химическое исследование

7. Ананичева С.А., Зеленцов С.В., Герасимова Э.В., Крапивницкая Т.О., Алыева А.Б., Песков Н.Ю., Глявин М.Ю. (ИПФ РАН, Нижний Новгород) Применение потенциала Морзе в расчетах энергии диссоциации связей гуминовой кислоты

8. Пластун И. Л., Назарьев Е.В. (СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов) Исследование межмолекулярного взаимодействия биомолекул и лекарственных препаратов методом теории функционала плотности

**13 ноября, среда**

10:00 – 11:20 Пленарные лекции

1. Сосорев А.Ю. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Установление связи между структурой и свойствами органических полупроводников: роль квантово-химических расчётов
2. Туровцев В.В. (ТГМУ, Тверь) Анггармонические модели расчёта термодинамических свойств в квантовой химии

11:20 – 11:40 Кофе-брейк

11:40 – 13:00 Пленарные лекции

1. Тупикина Е.Ю. (СПбГУ, Санкт-Петербург) Квантово-химические методы в исследовании нековалентных взаимодействий
2. Орлов В.Ю. (Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, Ярославль) Компьютерное моделирование при отборе структур для разработки новых активных фармацевтических субстанций

13:00 – 14:00 Обед

14:00 – 16:00 Устные доклады

1. Белецан О.Б., Боченкова А.В. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Влияние внутримолекулярной водородной связи на фотофизику модифицированного хромофорного аниона GFP
2. Брыксин К.А., Пластун И.Л., Бабков Л.М., Майорова О.А. (СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов) Анализ межмолекулярного взаимодействия гиалуроновой кислоты с водой
3. Лебедев И.С., Белова Н.В., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В. (ИГХТУ, Иваново) Возможности метода газовой электронографии для определения молекулярной структуры и состава насыщенного пара донорно-акцепторных комплексов на примере аддукта N-оксида пиридина и фторида бора (III)
4. Завьялова А.В. (Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева, Астрахань) Цеолиты и их модифицированные формы: квантово-химический расчет параметров кристаллических ячеек
5. Беликова А.А., Кованова М.А., Белова Н.В. (ИГХТУ, Иваново) Оценка некоторых свойств соединений, потенциально применимых для ингибирования белка SOS1, с помощью методов квантовой химии
7. Кулиев Р.Г., Белецан О.Б., Боченкова А.В. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Моделирование процессов безызлучательной релаксации возбуждённых состояний анионов биологических хромофоров
8. Даниленко А.А., Лазовский Д.А., Стужин П.А. (ИГХТУ, Иваново) О природе связи азот-центральный атом в макрогетероциклических соединениях неметаллов

9. Шубина А.А., Сирик А.В., Орлова Т.Н. (Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, Ярославль) Квантово-химическое исследование термодинамических параметров и колебательных спектров комплексных соединений лантана с органическими лигандами

10. Воронин А.П., Дрозд К.В., Венер М.В., Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново) Структурообразующие мотивы, полиморфизм и особенности КР-спектров фармацевтических солей антидепрессанта разагилина

16:00 – 16:20 Кофе-Брейк

16:20 – 17:00 Устные доклады

1. Янин А.О., Киселев В.Г., Бакланов А.В. (Новосибирский государственный университет, Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск) Расчет кинетического изотопного эффекта при диссоциации димеров полиглицина как модельной системы для денатурации белков

2. Левицкая А.И., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю. (ИОФХ им. А.Е. Арбузова, Казань) Дизайн азохромофоров и мультихромофоров как основы электрооптических материалов с использованием квантово-химических расчетов и атомистического моделирования

3. Кулёв В.А., Печникова Н.Л., Агеева Т.А. (ИГХТУ, Иваново) Предсказание каталитической активности металлокомплексов фталоцианинов

17:00 Стендовая сессия

**14 ноября, четверг**

10:00 – 11:20 Пленарные лекции

1. Berger R. (University of Salzburg, Austria) Aspects of Anti/Aromaticity and Molecular Structure

2. Барташевич Е.В., В.Г. Цирельсон (ЮУрГУ, Челябинск) Типы и свойства нековалентных связей с позиций неорбитальной теории функционала плотности

11:20 – 11:40 Кофе-брейк

11:40 – 13:00 Пленарные лекции

1. Батаев В.А. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Эти коварные обратные задачи, или насколько верны наши представления о потенциалах внутреннего вращения

2. Венер М.В. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Супрамолекулярные синтоны в многокомпонентных кристаллах триметилглицина с гуанидиновыми соединениями: от твердофазных исследований до димеризации в полярных апротонных растворителях

13:00 – 14:00 Обед

14:00 – 16:00 Устные доклады

1. Филин П.Д., Жулидин П.А., Пластун И.Л. (СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов) Моделирование взаимодействия бетулина с полярными растворителями на основе теории функционала плотности

2. Никитин И.А., Попков А.Д., Стужин П.А. (Иваново, ИГХТУ) DFT и TD DFT исследование молекулярной структуры и спектральных свойств диборных комплексов фталоцианинов
3. Ванеева Е.Е., Лепешкин С.В., Оганов А.Р. (Сколковский институт науки и технологий, Москва) Исследование структуры и стабильности нанокластеров, представляющих интерес для создания новых энергоёмких материалов
4. Сорокина Т.М., Овсянников Д.В. (ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород) Моделирование реакционной схемы фотовосстановления нитросоединения в присутствии донора водорода
5. Чикалов И.С., Пименов О.А., Завалишин М.Н. (ИГХТУ, Иваново) Квантово-химическое исследование молекулы гидразона пиридоксаль-5-фосфата и 2,4-динитрофенилгидразина в рамках теории функционала плотности
6. Меняйло И.Е., Пожаров М.В., Бурмистрова Н.А. (СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов) Квантовохимическое моделирование взаимодействия микотоксинов с органосиланами
7. Балагадашова И.Д., Магдалинова Н.А., Ключев М.В. (ИвГУ, Иваново) Квантово-химическое моделирование реакции жидкофазного гидрирования 5-нитросалициловой кислоты
8. Журко Г. А., Федорова А. А. (ООО НПФ Фабитекс, Иваново) Квантовохимическое предсказание кислотности карбоксильных кислот и фенолов
9. Плехович С.Д., Кутьин А.М., Плехович А.Д., Будруев А.В., Балыева К.В., Ростоккина Е.Е., Бирюкова Т.Ю. (ИХВВ РАН, Нижний Новгород) Моделирование системы алюмоиттриевый гранат легированный ионами Er и Ce

16:00 – 16:20 Кофе-Брейк

16:20 – 18:00 Устные доклады

1. Чеботаев П.П., Кононов А.И., Буглак А.А. (СПбГУ, Санкт-Петербург) Взаимодействие птерина и нанокластеров золота
2. Мухина В.А., Ерошин А.В., Шлыков С.А. (ИГХТУ, Иваново) Теоретическое и экспериментальное исследование строения молекулы дициклопентадиена
4. Сафрыгина В.А. (Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева, Астрахань) Квантово-химическое изучение структуры гексахлорбензола и *in silico* прогноз токсикологических характеристик
5. Рихмайер М.А., Рихмайер А.М., Орлов Ю.Д. (Тверской Государственный Университет, Тверь) Квантово-механический расчёт полупроводниковых характеристик гомологического ряда аценов
6. Князева А.А., Петрова У.А., Ерошин А.В., Жабанов Ю.А. (ИГХТУ, Иваново) Геометрическое и электронное строение окта(4-пропилфеноксифталоцианина и его металлокомплексов с Al(III), Ga(III) и In(III)
7. Яблонский М.Д., Смирнова А.А., Королев В.В., Марченко Е.И., Митрофанов А.А. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Конформационный поиск для малых органических молекул в газовой и твердой фазе с помощью алгоритма пчелиной колонии

8. Дубинец Н.О., Сосоров А.Ю. (ИСПМ им. Ениколопова РАН, Москва) Многомасштабное моделирование синих TADF флуорофоров на основе Cz-TRZ и оценка их стабильности

9. Говоров Д.Н., Боев А.О., Аксенов Д.А. (Сколковский институт науки и технологий, Москва) Исследование механизма переноса заряда металл-кислород в литий-обогащенных слоистых оксидах с окисленной анионной подрешеткой

### 15 ноября, пятница

10:00 – 11:20 Пленарные лекции

1. Митрофанов А.А. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Quantum chemistry meets machine learning

2. Новиков А.С. (СПбГУ, Санкт-Петербург) Компьютерное моделирование механизмов химических реакций и теоретические исследования различных нековалентных взаимодействий

11:20 – 11:40 Кофе-брейк

11:40 – 12:20 Пленарные лекции

1. Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново) Современная квантовая химия соединений переходных металлов и лантаноидов: достижения и проблемы

12:20 – 13:30 Устные доклады

1. Курочкин И.Ю., Гиричев Е.Г., Гиричев Г.В. (ИГХТУ, Иваново) Газофазная геометрическая структура диметилфосфино(перфтор)-фениленового и дифенилфосфино(3,3,4,4,5,5-гексафтор)-циклопентенилового комплексов золота(I)

2. Паламарчук И.В., Кулаков И.В. (Тюменский государственный университет, Тюмень) Синтез и фотохимические свойства новых производных оксазоло[5,4-b]пиридина

3. Гаджимурадов С. Г., Сулейманов С. И., Абдулагатов И. М. Абдулагатов А. И. (Дагестанский Государственный университет, Махачкала) Квантово-химическое моделирование термодинамических параметров молекул оксохлоридов металлов VI В группы

4. Тума А.А., Рыжако А.С., Отлётов А.А., Миненков Ю.В. (ФИЦ ХФ РАН, Москва) Влияние квантово-химического приближения, термодинамических и сольватационных поправок на конформационные энергии молекулярных кластеров органических карбонатов

5. Хайновский М.А., Терехова Е.О., Болдырева Е.В., Цирельсон В.Г. (РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва) Электронная плотность и упругие свойства кристалла  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{ClNO}_3$ : исследование методом квантовой кристаллографии

13:30 Закрытие школы-конференции

### Список докладов на стендовой сессии

1. Антонюк А.В., Юшина И.Д. (ЮУрГУ, Челябинск) Моделирование оптических и спектральных характеристик производных замещенных тетрагидротиофена с разветвленной сеткой водородных связей



2. П. И. Алексюнина, Л.М. Бабков, Н.А. Давыдова, И.В. Ивлиева(Перетоккина), М.А. Молькова (СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов) Проявление изомерии и водородной связи в ИК спектрах крезола
3. Балуева К.В., Плехович А.Д., Кутьин А.М., Плехович С.Д., Будруев А.В., Комишина М.Е., Шумовская К.Ф. (ИХВВ РАН, Нижний Новгород) Компьютерное моделирование ультрадисперсных стекол  $Bi_2O_3 - V_2O_3 - CaO$  для аддитивной технологии микрооптических устройств
4. Болдин А.А., Бородина О.С., Барташевич Е.В. (ЮУрГУ, Челябинск) Моделирование путей образования и окисления радикалов бензальдегида и их электронные свойства
5. Бондарь В.В., Кочетова Л.Б., Кустова Т.П. (ИвГУ, Иваново) Квантово-химическое исследование механизма взаимодействия фенилацетата с дипептидами в газовой фазе
6. Булавина А.С., Филиппов А.А., Федоров М.С. (ИвГУ, Иваново) Влияние окружения на геометрическое строение комплексов с водородной связью на основе производных пиридина и ароматических сульфокислот: квантово-химический анализ
7. Бумбина Н.В., Аконова О.Б., Жарникова Н.В., Смирнова А.И., Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново) Моделирование потенциальных звездообразных мезогенных люминофоров с фрагментами оксадиазола
8. Волкова Т.Г., Таланова И.О. (ИвГУ, Иваново) Особенности структуры молекулярного кристалла лейцина
9. Вьялкин Д.А., Рыжов И.В., Ерошин А.В., Жабанов Ю.А., Исляйкин М.К. (ИГХТУ, Иваново) Масс-спектры электронного удара гемипорфирина кобальта: эксперимент и теория
10. Твердова Н.В., Гиричев Е.Г. (ИГХТУ, Иваново) Система принятия решений для синхронного электронографического/масс-спектрометрического эксперимента и строение ионов, существующих в масс-спектре 1,4-бис(триметилсилил)-1,3-бутадиена
11. Григорьева Е.А., Бахтеева Е.И., Большаков О.И., Барташевич Е.В. . (ЮУрГУ, Челябинск) Квантово-химическое моделирование измеров тиазоло[3,2-с]хиназолиния, образованных при экзо- и эндоциклизации
12. Ершов В.В., Ткаченко О.Ю. (РТУ МИРЭА, Москва) Квантово-химическое исследование нуклеофильной атаки на  $\eta^3$ -аллильные комплексы палладия
13. Заев Д.А., Голанцов Н.Е. (РУДН, Москва) Молекулярный докинг и анализ водородных связей для деацетилаз гистонов: исследование взаимодействий с новыми ингибиторами
14. Игошин Ф.А., Борисова А.С., Наваркин И.С., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново) Высокоточное неэмпирическое исследование молекул моногалогенидов скандия и иттрия
15. Климчук Д.О., Варламова Л.А., Сорокин П.Б. (НИТУ «МИСИС», Москва) Резистивное переключение в наноструктуре биграфен/диаман, полученной на подложке  $La_3Ga_5SiO_{14}$  путем облучения пучком электронов

16. Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А. (ИГХТУ, Иваново) Структура индометацина как ключ к созданию твердых форм с заданными свойствами
17. Коновалова А.А., Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И. (ИвГУ, Иваново) Теоретическое исследование электронных спектров поглощения ди(5-фенил(1,3,4-оксадиазол-2-ил))бензола
18. Коробов М.А., Дунаев А.М., Моталов В.Б. (ИГХТУ, Иваново) Вклад конформеров в термодинамические свойства органических веществ в состоянии идеального газа на примере протеиногенных аминокислот
19. Красностанов Я.С., Кузовлев М.Д., Бородина О.С. . (ЮУрГУ, Челябинск) Алгоритм автоматизации в моделировании реакций с использованием методов метадинамики
20. Кузнецова Н.В., Золотоверхая Е.А., Беспалов А.Я., Кубарская Л.Г. (ФГБУ « Научно-клинический центр токсикологии им. академика С. Н. Голикова федерального медико-биологического агентства», Санкт-Петербург) In silico исследование биологической активности производных вальпроевой кислоты как перспективных противосудорожных препаратов
21. Кулев В.А., Гиричева Н.И., Смирнова А.И., Усольцева Н.В. (ИГХТУ, Иваново) Квантово-химическое моделирование конформеров производного порфирина  $A_3B$ -типа и их электронных спектров поглощения
22. Лесных А.А., Гурьянов К.Е., Елисеев Ан.А., Елисеев Ар.А. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Квантово-химические расчёты сорбции и транспорта молекул воды и лёгких спиртов в оксиде графена
23. Лобанов Н.В., Степанова А.В., Шишков И.Ф. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Квантово-химическое исследование равновесной структуры 3-амино-4-циано-1,2,5-оксадиазол-2-оксида
24. Наваркин И.С., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново) Строение и спектры трибромидов иттрия из первых принципов
25. Осокин В.С., Кулёв В.А., Деревеньков И.А. (ИГХТУ, Иваново) RedOx активность цианокобаламина от перефирической модификации
26. И.В.Ивлиева(Перетокина), А.А. Мещерякова, Л.М. Бабков, В.В.Сорокин (СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов) Строение и колебательные спектры пиридо[1,2-а]пиримидиновых систем.
27. Пикулин И.С., Карпов К.В. (МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва) Разработка алгоритма параметризации полуэмпирического метода PM7 для f-элементов
28. Плехович А.Д., Кутьин А.М., Плехович С.Д., Будруев А.В., Балуева К.В., Ростоккина Е.Е., Комшина М.Е. . (ИХВВ РАН, Нижний Новгород) Квантовохимический расчет и спектроскопия наноразмерного алюмоиттриевого граната при получении стеклокерамики методом СЛС
29. Погонин А.Е., Завалишин М.Н., Гамов Г.А. (ИГХТУ, Иваново) Молекулярная структура гидразона флуоресцеина и 2,4-диметоксибензальдегида

30. Салькова А.М., Лапыкина Е.А. (ИвГУ, Иваново) Оценка влияния диффузных функций базисного набора на геометрические и энергетические параметры тристриазолотриазина
31. Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново) Об ошибках теоретического описания свойств соединений лантаноидов, вызванных включением 4f-электронов в состав эффективных остовных потенциалов
32. Смородин С.В., Твердова Н.В., Гиричева Н.И., Гиричев Г.В. (ИГХТУ, Иваново) Особенности внутреннего вращения в молекулах Ph-Ph, Ph-C≡C-Ph и Ph-C≡C-C≡C-Ph
33. Быков А.В., Демиденко Г.Н., Спиридонова Ю.В. (ТвГТУ, Тверь) Влияние температуры на координацию кластеров M<sub>4</sub>, M<sub>9</sub>, M<sub>19</sub> с ароматическими звеньями стирол-дивинилбензольных сополимеров в отсутствии растворителя
34. Степанова Д.В., Александрова Д.А., Меламед Т.Б., Лузенина Л.А., Баберкина Е.П., Якушин Р.В. (РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва) Установление направления протекания ряда ион-молекулярных реакций с помощью квантово-химического программного пакета ORCA
35. Уваров А.А., Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново) Высокоточное теоретическое описание свойств тяжёлых щелочных металлов и их соединений
36. Черепанова М.В., Лисицкий Т.М., Веселов И.Н., Никольский В.М. (ТвГУ, Тверь) Квантово-химический анализ комплексонов на основе аминокислот
37. Чудакова О.Г., Шипикина Н.В., Чудакова К.Е. (АО «Казанский Завод Синтетического Каучука», Казань) Прогнозирование химических и физико-механических свойств полимеров
38. Шагалов Е.В., Погонин А.Е., Киселев А.Н., Майзлиш В.Е. (ИГХТУ, Иваново) Молекулярное строение 5,6-бис(4-иодфенил)пирозин-2,3- дикарбонитрила
39. Ерошин А.В., Шлыков С.А. (ИГХТУ, Иваново) Структура и конформационные особенности соединений, содержащих трифлильные группы, связанные с эндоциклическими атомами азота
40. Щетинкина М.А., Бородина О.С., Барташевич Е.В. (ЮУрГУ, Челябинск) Моделирование реакции кинетического расщепления орто-замещенных пиперидинов методами QM/MM (NEB)
41. Жабанов Ю.А., Ерошин А.В., Пахомов Г.Л. (ИГХТУ, Иваново) Термодинамика сублимации и электронные спектры комплекса этиопорфирина-III с ванадилем