

1-ая Всероссийская конференция-школа
«Высокореакционные интермедиаты химических реакций»

Председатель Оргкомитета – член-корреспондент РАН М.П.Егоров

Заместитель председателя – профессор М.Я.Мельников

Члены Оргкомитета:

академик Алдошин С.М., академик Алфимов М.В., академик Белецкая И.П.,
академик Бучаченко А.Л., академик Казанский В.Б. , академик Минкин В.И.,
академик Моисеев И.И., академик Молин Ю.Н., академик Нефедов О.М., член-
корреспондент Синяшин О.Г., член-корреспондент Чарушин В.О., член-
корреспондент Гехман А.Е.

ПРОГРАММА

9 апреля

Заезд участников в пансионат «Юность» после 19.00

Проезд в пансионат - станция метро «Щелковская», далее автобусом или маршрутным такси 320, 321 до остановки «пансионат Юность»

10 апреля

Заезд участников в пансионат «Юность». Регистрация участников 10.00

Проезд в пансионат - станция метро «Щелковская», далее автобусом или маршрутным такси 320, 321 до остановки «пансионат Юность»

9 ⁰⁰ -10 ⁰⁰	Завтрак
10 ³⁰ -11 ⁰⁰	Мисочко Е.Я. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «Синтез и внутренняя стабильность простейшего кетокарбена (формилметилена, C ₂ H ₂ O) в твердом аргоне»
11 ⁰⁰ -11 ³⁰	Грицан Н.П. (ИХКиГ СО РАН, Новосибирск) «Кинетические, спектроскопические и квантовохимические исследования арилнитренов»
11 ³⁰ -11 ⁵⁰	Чапышев С.В. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «ЭПР квинтетных динитренов»

11 ⁵⁰ -12 ¹⁰	Боровков В.И. (ИХКиГ СО РАН, Новосибирск) «Исследование анион-радикалов молекул с отрицательным газофазным сродством к электрону»
12 ¹⁰ -12 ⁴⁰	Фельдман В.И. (химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, ИСПМ им. Н.С.Ениколопова) «Метастабильные гидриды инертных газов: новый класс необычных молекул и радикалов»
12 ⁴⁰ -13 ⁰⁰	Калетина М.В. (ИХКиГ СО РАН, Новосибирск) «Быстрые процессы и промежуточные частицы в фотохимии 7,7-диметилгерманорборнадиена»
13 ⁰⁰ -13 ²⁰	Нуждин К.Б. (химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова) «Структура и реакции катион-радикалов некоторых бифункциональных соединений».
13 ²⁰ -13 ⁵⁰	М.П. Егоров (ИОХ РАН им.Н.Д.Зелинского) «От силиленов к станниленам: основные тенденции в реакционной способности и механизмах реакций аналогов карбенов»
14 ¹⁵ -15 ⁰⁰	Обед
15 ³⁰ -16 ⁰⁰	Трахтенберг Л.И. (ГНЦ «НИФХИ им.Л.Я.Карпова») «Роль давления и температуры в туннельных твердофазных реакция с переносом атома водорода»
16 ⁰⁰ -16 ³⁰	Мельников М.Я. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Матричная стабилизация интермедиатов на активированной поверхности твердых тел»
16 ³⁰ -17 ⁰⁰	Фаустов В.И. (ИОХ РАН им.Н.Д.Зелинского) «Квантово-химическое исследование каскадных реакций аналогов карбенов»
17 ¹⁵ -17 ⁴⁵	Перерыв
18 ⁰⁰ -18 ²⁰	Сырцова Л.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «Восстановление нитроэфиров – доноров NO гемоглобином с участием цистеина через интермедиат – нитритотиол»
18 ²⁰ -18 ⁴⁰	Кондаков С.Э. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Использование кинетических параметров для конструирования новых фармацевтических препаратов»

11 апреля	
9⁰⁰-10⁰⁰	Завтрак
10³⁰-11⁰⁰	Немухин А.В. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Интермедиаты в реакциях ферментативного катализа: Моделирование и экспериментальные наблюдения»
11⁰⁰-11²⁰	Венер М.В. (РХТУ им.Д.И.Менделеева) «Структура и динамика кластеров $n \cdot \text{H}_2\text{O}:\text{H}-\text{СНА}$, где $n = 1-4$. Расчеты методами теории функционала плотности с периодическими граничными условиями»
11²⁰-11⁴⁰	Мисуркин И.А. (ГНЦ «НИФХИ им.Л.Я.Карпова») «Сольватированные электроны в полярных жидкостях для химических реакций»
11⁴⁰-12¹⁰	Саркисов О.М. (ИХФ РАН) «Интермедиаты на фемтосекундной шкале времени»
12¹⁰-12³⁰	Кленина И.Б. (ИФПБ РАН, Пущино) «Исследование механизма первичной фотохимической реакции в реакционных центрах фотосистемы 2»
12³⁰-13⁰⁰	Вайнштейн Ю.А. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) "Управление фотореакционной способностью серусодержащих координационных соединений"
13⁰⁰-13²⁰	Лукова Г.В. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «Фотофизический подход к исследованию координационных взаимодействий предкатализаторов на основе комплексов IV Б группы»
13²⁰-13⁵⁰	Плюснин В.Ф. (ИХКиГ СО РАН, Новосибирск) «Процессы для фотохромных систем, работающих на основе координации S-радикалов с плоскими комплексами Ni(II)»
14¹⁵-15⁰⁰	Обед
15⁰⁰-16⁰⁰	Стендовая сессия
16⁰⁰-16³⁰	Иванова И.И. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Активация пропана на моно- и бифункциональных цеолитных катализаторах»
16³⁰-16⁵⁰	Шабатина Т.И. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Метастабильные комплексы переходных металлов с алкилцианобифенилами»

16 ⁵⁰ -17 ¹⁰	Грибанова Т.Н. (НИИ физической и органической химии Ростовского государственного университета, Ростов-на-Дону) «Квантово-химическое исследование взаимодействия антрилсодержащих тиокарбамидов с катионами металлов ПВ группы»
17 ¹⁵ -17 ⁴⁵	Перерыв
17 ⁴⁵ -18 ⁰⁵	Пай З.П. (ИК СО РАН, Новосибирск) «Гомогенные катализаторы на основе пероксополиоксометаллатных комплексов для реакций окисления органических субстратов»
18 ⁰⁵ -18 ²⁵	Голубева Е.Н. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Активные центры и промежуточные частицы в радикальных реакциях хлоруглеводородов, катализируемых комплексами меди»
18 ¹⁰ -18 ⁴⁰	Гехман А.Е. (ИОНХ РАН, Москва) «Интермедиаты каталитического гидроперекисного окисления»
12 апреля	
9 ⁰⁰ -10 ⁰⁰	Завтрак
10 ⁰⁰ -10 ³⁰	Шуб Б.Р. (ИХФ РАН, Москва) «Зондовые методы исследования несовершенных наноструктур»
10 ³⁰ -11 ⁰⁰	Стахеев А.Ю. (ИОХ РАН им.Н.Д.Зелинского) «Перенос интермедиатов гетерогенных каталитических реакций через газовую фазу – влияние на протекание реакций гидрирования, раскрытия C ₆ -цикла и селективного восстановления оксида азота»
11 ⁰⁰ -11 ³⁰	Казанский В.Б. (ИОХ РАН им.Н.Д.Зелинского) «Использование интенсивностей колебательных полос ИК поглощения для характеристики промежуточных продуктов гетерогенных кислотно-каталитических реакций»
11 ³⁰ -12 ⁰⁰	Кустов Л.М. (ИОХ РАН им.Н.Д.Зелинского, Москва) "Operando спектроскопия в катализе"
12 ³⁰ -13 ⁰⁰	Анаников В.П. (ИОХ РАН им.Н.Д.Зелинского, Москва) «Исследование интермедиатов каталитических реакций с помощью спектроскопии ЯМР и квантово-химических расчетов»

13 ⁰⁰ -13 ²⁰	Костенко С.С. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «Расчетная модель окислительно-паровой конверсии метана в синтез-газ в кинетически неоднородной волне фильтрационного горения»
13 ²⁰ -13 ⁴⁰	Николаев А.А. (Казанский государственный университет, Казань) «Комплексы Pd, Mo и W и их превращения в фосфорилировании олефинов и алкинов»
13 ⁴⁰ -14 ⁰⁰	Обвинцева Л.А. (ГНЦ «НИФХИ им.Л.Я.Карпова») «Кинетика гетерогенной гибели активных частиц в трубке с ламинарным потоком»
14 ¹⁵ -15 ⁰⁰	Обед
15 ⁰⁰ -15 ²⁰	Хамитов Э.М. (ИОХ УНЦ РАН, Уфа) «Зарождение активных центров ионно-координационной полимеризации. DFT исследование»
15 ²⁰ -15 ⁴⁰	Фризен А.К. (ИОХ УНЦ РАН, Уфа) «Квантово-химическое исследование интермедиатов полимеризации этилена в присутствии ферроцена»
15 ⁴⁰ -16 ⁰⁰	Семесько Д.Г. (Башкирский государственный университет, г.Уфа) «Механизм рекомбинации пероксильных радикалов: новый теоретический взгляд»
16 ⁰⁰ -16 ²⁰	Непопалова И.В. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Структура и реакционная способность аллильных комплексов золота»
16 ²⁰ -16 ⁴⁰	Асафьева Е.В. (химический институт им. А.М.Бутлерова КГУ, Казань) «Механизм замещения лигандов в (1,3,5-триорганил-1,3,5-триазациклогексан)трикарбонилмолибдене»

Стендовые доклады

1	Шамсиев Р.С., Флид В.Р. «Теоретическое исследование интермедиатов Ni(C ₇ H ₈) ₂₋₄ в процессе каталитической циклодимеризации норборнадиена»
2	Шамсиев Р.С., Белов А.П. «Образование β-агостических интермедиатов в процессе окисления этилена (Вакер-процесс)»
3	Шамсиев Р.С., Флид В.Р., Белов А.П. «Пяти- и шестикоординационные интермедиаты в процессах окисления гидроксодержащих η ³ -аллильных комплексов палладия»

4	Обвинцева Л.А., Оксенгойт Е.А., Дмитриева М.П., Кучаев В.Л., Аветисов А.К., Чибирова Ф.Х. «Взаимодействие хлористого водорода с полупроводниковыми оксидами металлов при переменной влажности воздуха»
5	Комарова Н.С., Кривенко А.Г. «Автоэмиссионная генерация активных интермедиатов в катодной области потенциалов»
6	Мясникова Ю.В., Тертышная Ю.В., Шибряева Л.С. «Влияние γ -излучения на структуру и кинетику процесса кристаллизации смесей синтетического этиленпропиленового каучука и поли-3-гидроксипропаната»
7	Фокина И.В., Ляшков В.М., Фионов А.В., Бутова М.В., Лукин В.В. «Структура комплексов антрахинона и флуоренона с координационно-ненасыщенными ионами алюминия»
8	Кондратович В.Г., Круговов Д.А., Русина И.Ф., Касаикина О.Т. «Радикальные интермедиаты гидрированных хинолинов при окислении в различных условиях»
9	Артемова Н.К., Рогачев Б.Г., Смирнов В.А. «Синтез и фотохромные свойства солей спиро[бензопиран-индолинового] ряда»
10	Лукова Г.В., Васильев В.П., Смирнов В.А. «Исследование взаимодействия металлоценового предкатализатора с растворителями»
11	Гапуренко О.А., Грибанова Т.Н., Миняев Р.М., Минкин В.И. «Октакоординированный углерод в производных тетрааминометана CN_4M_4 ($M = Be, Mg, Ca$)»
12	Гридин М.К., Милов А.А. «Теоретическое исследование внутримолекулярной $X \cdots D$ координации в системах $RX(YCH_2CH_2)_2D$ ($D = NH, PH, S, O; X = P, As, Sb, Bi; Y = CH_2, NH, O; R = H, F$)»
13	Зималиев М.В., Курамшин А.И., Черкасов Р.А. «Влияние металлоцентра на реакционную способность координированных гетеродиенов»
14	Биляченко А.Н., Левицкий М.М., Завин Б.Г. «Квантово-химическое моделирование межмолекулярной перегруппировки металлоорганосилоксанов»
15	Белоконь Е.А., Калугина А.Д., Пергушов В.И., Мельников М.Я. «Фотохимия катион-радикалов 1,3-диоксана и 1,3-диоксолана в низкотемпературных матрицах».