

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

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

<b>11 апреля</b>	
<b>9<sup>00</sup>-10<sup>00</sup></b>	<b>Завтрак</b>
<b>10<sup>30</sup>-11<sup>00</sup></b>	<b>Немухин А.В. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Интермедиаты в реакциях ферментативного катализа: Моделирование и экспериментальные наблюдения»</b>
<b>11<sup>00</sup>-11<sup>20</sup></b>	<b>Венер М.В. (РХТУ им.Д.И.Менделеева) «Структура и динамика кластеров <math>n \cdot \text{H}_2\text{O}:\text{H}-\text{СНА}</math>, где <math>n = 1-4</math>. Расчеты методами теории функционала плотности с периодическими граничными условиями»</b>
<b>11<sup>20</sup>-11<sup>40</sup></b>	<b>Мисуркин И.А. (ГНЦ «НИФХИ им.Л.Я.Карпова») «Сольватированные электроны в полярных жидкостях для химических реакций»</b>
<b>11<sup>40</sup>-12<sup>10</sup></b>	<b>Саркисов О.М. (ИХФ РАН) «Интермедиаты на фемтосекундной шкале времени»</b>
<b>12<sup>10</sup>-12<sup>30</sup></b>	<b>Кленина И.Б. (ИФПБ РАН, Пущино) «Исследование механизма первичной фотохимической реакции в реакционных центрах фотосистемы 2»</b>
<b>12<sup>30</sup>-13<sup>00</sup></b>	<b>Вайнштейн Ю.А. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) "Управление фотореакционной способностью серусодержащих координационных соединений"</b>
<b>13<sup>00</sup>-13<sup>20</sup></b>	<b>Лукова Г.В. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «Фотофизический подход к исследованию координационных взаимодействий предкатализаторов на основе комплексов IV Б группы»</b>
<b>13<sup>20</sup>-13<sup>50</sup></b>	<b>Плюснин В.Ф. (ИХКиГ СО РАН, Новосибирск) «Процессы для фотохромных систем, работающих на основе координации S-радикалов с плоскими комплексами Ni(II)»</b>
<b>14<sup>15</sup>-15<sup>00</sup></b>	<b>Обед</b>
<b>15<sup>00</sup>-16<sup>00</sup></b>	<b>Стендовая сессия</b>
<b>16<sup>00</sup>-16<sup>30</sup></b>	<b>Иванова И.И. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Активация пропана на моно- и бифункциональных цеолитных катализаторах»</b>
<b>16<sup>30</sup>-16<sup>50</sup></b>	<b>Шабатина Т.И. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Метастабильные комплексы переходных металлов с алкилцианобифенилами»</b>

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

13 <sup>00</sup> -13 <sup>20</sup>	Костенко С.С. (ИПХФ РАН, Черноголовка) «Расчетная модель окислительно-паровой конверсии метана в синтез-газ в кинетически неоднородной волне фильтрационного горения»
13 <sup>20</sup> -13 <sup>40</sup>	Николаев А.А. (Казанский государственный университет, Казань) «Комплексы Pd, Mo и W и их превращения в фосфорилировании олефинов и алкинов»
13 <sup>40</sup> -14 <sup>00</sup>	Обвинцева Л.А. (ГНЦ «НИФХИ им.Л.Я.Карпова») «Кинетика гетерогенной гибели активных частиц в трубке с ламинарным потоком»
14 <sup>15</sup> -15 <sup>00</sup>	Обед
15 <sup>00</sup> -15 <sup>20</sup>	Хамитов Э.М. (ИОХ УНЦ РАН, Уфа) «Зарождение активных центров ионно-координационной полимеризации. DFT исследование»
15 <sup>20</sup> -15 <sup>40</sup>	Фризен А.К. (ИОХ УНЦ РАН, Уфа) «Квантово-химическое исследование интермедиатов полимеризации этилена в присутствии ферроцена»
15 <sup>40</sup> -16 <sup>00</sup>	Семесько Д.Г. (Башкирский государственный университет, г.Уфа) «Механизм рекомбинации пероксильных радикалов: новый теоретический взгляд»
16 <sup>00</sup> -16 <sup>20</sup>	Непопалова И.В. (химический ф-т МГУ им.М.В.Ломоносова) «Структура и реакционная способность аллильных комплексов золота»
16 <sup>20</sup> -16 <sup>40</sup>	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 <sub>7</sub> H <sub>8</sub> ) <sub>2-4</sub> 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 гидроксосодержащих η <sup>3</sup> -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 $\gamma$ -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».