

## ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ \*

13 апреля

### Утреннее заседание

**10.00** Открытие конференции

**10.10** Зефирова Н.С., Палюлин В.А. (плeнарный доклад)

*Молекулярное моделирование в создании новых лекарств*

**11.10** Курамшина Г.М. (плeнарный доклад)

*Квантовая механика и колебательная спектроскопия: новые рубежи и новые проблемы?*

**12.10** Баранов В.И.

*Количественная теория фотохимических процессов. Квантовые выходы реакций*

**12.30** Кирий А.Ю., Новосадов Б.К.

*Кватернионный анализ фундаментальных решений уравнения Дирака для электрона во внешнем поле и их связь с классической функцией действия*

**12.50-14.00** Перерыв

### Вечернее заседание

**14.00** Жохова Н.И., Баскин И.И., Карпов В.П., Зефирова А.Н., Зефирова Н.С.

*Построение моделей "структура-активность" при помощи непрерывных молекулярных полей*

**14.20** Беляков В.А., Васильев Р.Ф., Трофимов А.В., Федорова Г.Ф.

*Оценка вероятности бимолекулярного элементарного процесса путем моделирования жидкофазного опыта по Френкелевой теории клетки*

**14.40** Лобанов А.В., Кобзев Г.И., Синько Г.В., Смирнов Н.А., Неврова О.В., Комиссаров Г. Г.

*Фотосенсибилизирующая и фотокаталитическая активность хлорофилла в процессах взаимопревращения  $O_2$  и  $H_2O_2$ : экспериментальное и квантовохимическое исследование*

**15.00** Кузьмин В.Е., Муратов Е.Н., Артеменко А.Г., Полищук П.Г.

*Возможности, "ловушки" и перспективы использования концепции структурного подобия для задач "структура - свойства"*

**15.20** Корнилов М.Ю.

*Трехмерные модели из карбиновых нитей*

**15.40-18.00** Стендовая секция (доклады №№ 1-39)

---

\* Время на доклады: пленарные – 40 мин + 20 мин для ответов на вопросы  
устные – 15 мин + 5 мин для ответов на вопросы

**14 апреля**

**Утреннее заседание**

- 10.00 Поленов Е.А., Мельников П.В. (пленарный доклад)**  
*Фторорганические структуры с открытыми оболочками. Граничные МО в модельных задачах спектроскопии ЭПР*
- 11.00 Павлючко А.И.**  
*Вычисление полуширин колебательных полос поглощения многоатомных молекул при решении колебательно-вращательной задачи*
- 11.20 Молодцов С. Г., Блинов К. А., Эляшберг М. Е.**  
*Использование молекулярной симметрии при генерации структур по данным 2М ЯМР спектроскопии*
- 11.40 Морозов Д.И., Поляков И.В., Григоренко Б.Л.**  
*Исследование реакции декарбоксилирования зелёного флуоресцентного белка методами квантовой химии*
- 12.00 Ниукканен А.В.**  
*О вычислении энтропийных потенциалов модельных волновых функций*
- 12.20 Овчинников В.А., Крисюк Б.Э., Майоров А.В., Попов А.А.**  
*Квантово-химический расчет многоконфигурационными методами константы скорости озонлиза деформированного и недеформированного цис- и транс-бутена-2*
- 12.40-14.00 Перерыв**

**Вечернее заседание**

- 14.00 Поляков И.В., Григоренко Б.Л., Немухин А.В.**  
*Структурные формы зеленого флуоресцентного белка и его мутантов по данным комбинированного метода квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ)*
- 14.20 Позднеев С.А.**  
*Химическая связь и резонансы*
- 14.40 Полищук П.Г., Артеменко А.Г., Кузьмин В.Е.**  
*Интерпретация QSAR моделей полученных методом Random Forest*
- 15.00 Долгоносов А.М., Прудковский А.Г.**  
*Эффект внутримолекулярного вращения при адсорбции молекул*
- 15.20 Прудковский А.Г., Долгоносов А.М.**  
*Учет влияния конформационной перестройки макромолекулы неподвижной фазы при расчете констант Генри*
- 15.40-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 40-78)**

## 15 апреля

### Утреннее заседание

- 10.00 Грибов Л.А. (пленарный доклад)**  
*Постановка квантовых задач в теории строения и свойств молекул*
- 11.00 Дементьев В.А. (пленарный доклад)**  
*Средства прогнозирования событий в больших, вплоть до нано-размерных, молекулярных системах*
- 12.00 Эляшберг М.Е., Блинов К.А., Смурный Е.Д., Чуранова Т.С.**  
*Эмпирические и квантовые методы предсказания спектров ЯМР: проблема выбора*
- 12.20 Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.**  
*Моделирование нелинейно-оптической активности органических дендритных молекулярных систем*
- 12.40-14.00 Перерыв**

### Вечернее заседание

- 14.00 Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А., Зефилов Н.С.**  
*Моделирование геометрических свойств узловых поверхностей многоэлектронных волновых функций*
- 14.20 Шагидуллин А.Р., Зверева Е.Е., Кацюба С.А.**  
*Квантово-химическое прогнозирование спектральной кривой в ИК и КР спектрах больших молекул*
- 14.40 Шульга Д.А., Титов О.И., Коротаев А.В., Ситников Г.В., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.**  
*Перспективы эмпирического описания молекулярных электростатических взаимодействий посредством атомных зарядов*
- 15.00 Мельников П.В., Поленов Е.А.**  
*Температурное представление спектральной плотности в изотропной СТС спектров ЭПР фторалкилированных анион-радикалов в условиях динамической модуляции*
- 15.20-17.30 Стендовая секция (доклады №№ 79-117)**
- 17.30 Закрытие конференции. Итоги**

## СТЕНДОВАЯ СЕКЦИЯ

1. **Агаева Г.А.** Молекулярное моделирование оптимальных пространственных структур аналогов С-концевого гептапептида молекулы физалаемина.
2. **Азриель В.М., Акимов В.М., Русин Л.Ю.** Траекторное моделирование динамики неадиабатической диссоциации молекул КJ в столкновениях с атомами ксенона.
3. **Азриель В.М., Акимов В.М., Русин Л.Ю., Севрюк М.Б.** Оптимизация параметров парных потенциалов  $Cs^+-Rb^+$  и  $Cl^-I$  в системе  $CsCl + RbI$  с помощью линейного регрессионного анализа.
4. **Азриель В.М., Кабанов Д.Б., Русин Л.Ю.** Исследования детальной динамики элементарных процессов методом визуализации траектории столкновения.
5. **Аминова Р.М., Мартыничук Э.Р., Аганов А.В., Чачков Д.В.** Квантовохимическое моделирование структуры молекулярных кластеров фосфорсодержащих молекул с молекулами ацетона. Расчеты констант магнитного экранирования ядер фосфора  $^{31}P$  в растворах.
6. **Анашкин А.А., Бурова Т.Г.** Квантово-механический анализ распределения интенсивностей в спектрах гиперкомбинационного рассеяния многоатомных молекул.
7. **Андрианов В.М., Королевич М.В.** Полный расчет колебательного спектра молекулы (22S,23S)-28-гомобрасинолида в двух возможных конформациях.
8. **Андрійченко Н.Н., Хренова М.Г.** Механизмы реакций гидролиза циклических нуклеозидмонофосфатов по данным расчетов комбинированным методом квантовой и молекулярной механики.
9. **Артюх А.А., Чернозатонский Л.А.** Графен – нанотрубные соединения.
10. **Артюхов В.И., Зубков А.С., Неделина О.С., Чернозатонский Л.А.** Моделирование процессов захвата электрона связанным протоном оксикислот А-ОН в водной среде.
11. **Ахвердиева Г.А., Годжаев Н.М., Набиев А.М.** Компьютерное моделирование трехмерной структуры LVV-геморфина-7.
12. **Бабков Л.М., Давыдова Н.А., Моисейкина Е.А.** Моделирование структуры и колебательных спектров циклогексанола в различных полиморфных модификациях.
13. **Бабков Л.М., Моисейкина Е.А., Королевич М.В.** Структурно-динамическая модель метил-β-D-глюкопиранозида и водородная связь.
14. **Будыка М.Ф.** Расчеты путей фотоизомеризации и фотоциклизации стирилнафталинов и производных.
15. **Васильев Р.Ф., Володькин А.А., Трофимов А.В., Цаплев Ю.Б.** Квантовая химия - настольный инструмент экспериментатора? Сравнение полуэмпирических методов с их последними версиями (пакет MORAC 2009).

16. **Васильев Е.В., Павлючко А.И.** Оценка точности квантово-химического вычисления интенсивностей колебательных полос поглощения многоатомных молекул.
17. **Волкова Т.Г., Стерликова И.О., Магдалинова Н.А., Сулова А.А.** Межмолекулярные взаимодействия в димере п-н-бутилоксибензилиден-п`-толуидина: терминальная конфигурация.
18. **Гарифзянова Г.Г., Чачков Д.В., Шамов А.Г.** Квантово-химическое моделирование адсорбции водорода на кластере Pt<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>.
19. **Гастилевич Е.А., Волкова Л.В., Клименко В.Г., Нурмухаметов Р.Н.** Внутримолекулярные взаимодействия и дейтерозэффект в безызлучательной дезактивации низшего триплетного состояния антрацена и нафталина.
20. **Годжаев Н.М., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М., Исмаилова Л.И.** Структурная организация молекул миомодулинов.
21. **Гречухина О.Н., Нуралиева Д.М., Элькин П.М.** Моделирование колебательных состояний пиридинкарбоксильных кислот.
22. **Грязнова Т. П., Кацюба С. А., Шакирова О. Г., Лавренова Л. Г.** Исследование спинового перехода Fe(II) в комплексах с трис(пиразол-1-ил)метаном методами ИК-спектроскопии и квантовой химии.
23. **Дементьев В.А.** Система визуального моделирования колебаний молекул в вычислительной среде Matlab.
24. **Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И.** Теоретический расчет структуры и колебательных спектров двух таутомерных форм молекулы карнозина методом функционала плотности.
25. **Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н.** Моделирование пространственной структуры полимерного комплекса карнозина с цинком.
26. **Демухамедова С.Д.** Моделирование тетракомплексов карнозина с атомом меди.
27. **Денисов Е.Т., Денисова Т.Г.** Кинетическое моделирование окислительной деструкции артемизинина и его производных.
28. **Джапаридзе К.Г., Девадзе Л.В., Майсурадзе Дж.П., Сепашвили Н.О., Петриашвили Г. Ш.** Аномально высокая растворимость спиропиранов.
29. **Джапаридзе К.Г., Девадзе Л.В., Майсурадзе Дж.П., Гугава М.Т., Ахобадзе Ш.А.** Влияние индолиновой части молекулы на фотохромные свойства спиропиранов.
30. **Джапаридзе К.Г., Майсурадзе Дж.П., Бакурадзе Р.Ш., Ахобадзе Ш.А.** Некоторые вопросы строения молекулы окрашенной формы спиропиранов.
31. **Джалмухамбетова Е.А., Шальнова Т.А., Элькин М.Д.** Моделирование структуры и колебательных состояний замещенных нафтазарина.
32. **Джалмухамбетова Е.А., Смирнов А.П., Элькин П.М.** Структурно-динамические модели полихлорзамещенных дибензоциклов.

33. **Дзябченко А.В.** Моделирование протонной структуры газовых гидратов.
34. **Дзябченко А.В.** Применение модельного расчета для изучения твердофазных процессов в энергетических материалах.
35. **Дмитрук А.Ф., Заречная О.М., Опейда И.А.** Ван-дер-ваальсовское взаимодействие метана с димером овалена.
36. **Долинина Т.Ю., Лужков В.Б.** Исследование связывания производных фуллерена C<sub>60</sub> с ВИЧ-протеазой и кальциевой АТФазой методами квантовой механики и докинга.
37. **Долинина Т.Ю., Русова Н.С., Лужков В.Б.** Молекулярное моделирование взаимодействия металлофуллеренов Me<sup>+</sup>@C<sub>60</sub> с водным окружением.
38. **Дридгер В.Е.** О влиянии заместителей на квантовый выход фотохимической реакции.
39. **Егорова В.В., Крылов А.В.** Роль катиона натрия в реакциях нуклеофильного замещения с участием солей Na<sub>2</sub>PdCl<sub>4</sub> и CH<sub>3</sub>ONa.
40. **Жильцов В.В., Казакова В.М.** Моделирование электронного строения и спектров ЭПР анион-радикалов кремнийорганических соединений.
41. **Иванов Ю.В., Костенко А.А.** Расчеты характеристических колебаний карбонильных групп β-дикетонов и их галогензамещенных.
42. **Иванов Ю.В., Цой Л.А.** Квантовохимическое исследование механизма реакции β-дикетонов с электрофильными агентами.
43. **Иванова Н.М.** Изучение межмолекулярного взаимодействия винилацетиленовых спиртов с сульфидом цинка.
44. **Исмаилова Л.И., Аббаслы Р.М., Ахмедов Н.А.** Пространственная структура иммуноактивных пептидов.
45. **Исхаков М.Х.** Моделирование и расчет квантовых выходов разветвленных фотохимических реакций.
46. **Кадров Д.М., Тен Г.Н., Баранов В.И.** Интерпретация колебательного спектра цвиттер-ионной формы аланина.
47. **Калниньш К.К.** Перенос водорода в донорно-акцепторных комплексах.
48. **Карпов П.В., Баскин И.И., Палюлин П.В., Зефирова Н.С.** Искусственные нейронные сети как инструмент виртуального скрининга на основе одноклассовой классификации.
49. **Кладиева А.С., Степанович Е.Ю., Элькин М.Д.** Колебательные спектры и структурно-динамические модели продуктов гидролиза G-агентов.
50. **Князев С.П., Гордеев Е.Г., Костюкович А.Ю.** Анализ топологии функции полной электронной плотности в молекулах дикарба-нидо-ундекаборатов(2-).
51. **Князев С.П., Гордеев Е.Г., Костюкович А.Ю.** Перегруппировки в ряду дикарба-нидо-ундекаборатов.

52. **Князев С.П., Гордеев Е.Г., Белова Л.О., Абрамкин А.М., Шелудяков В.Д., Панфилова В.М., Плетнева М.В., Кирилин А.Д.** Квантово-химическое исследование механизма реакции присоединения диазолов к винилорганосиланам.
53. **Колесникова Е.В., Русин Л.Ю.** Метод исследования граничных условий реализации элементарного процесса прямой трехтельной рекомбинации ионов  $\text{Cs}^+$  и  $\text{Vg}^-$  с участием третьего тела.
54. **Колесникова Л.И., Русин Л.Ю., Севрюк М.Б.** Статистика движения классических ионов  $\text{Cs}^+$  и  $\text{Cl}^-$  в замкнутой потенциальной полости в полимере с акцепторами и донорами электронов.
55. **Комяк А.И., Ксенофонов М.А., Чибирай П.С., Шундалов М.Б.** Исследование строения и колебательных спектров димеров диметилформамида методом теории функционала плотности.
56. **Королевич М.В., Андрианов В.М., Чеченина Е.П.** Моделирование ИК спектров нитратов моносахаридов.
57. **Кочетова Л.Б., Калинина Н.В., Кустова Т.П.** Квантово-химическое моделирование маршрута реакции циклогексилamina с фениловым эфиром бензойной кислоты с учетом влияния растворителя.
58. **Кочетова Л.Б., Калинина Н.В., Кустова Т.П., Ишкулова Н.Р.** Квантово-химическое моделирование пути реакции аммиака с фениловыми эфирами бензойной кислоты с учетом влияния растворителя.
59. **Крисюк Б.Э., Майоров А.В., Мамин Э.А., Попов А.А.** Влияние заместителя при двойной связи и ее деформации на реакцию озона с этиленом.
60. **Кулагина Т.П., Карнаух Г.Е., Кузина А.Н.** Моделирование сигналов спиновых эхо ЯМР и диффузионного затухания в полимерах.
61. **Кунилова И.В., Шимкунас Я.М., Вигдергауз В.Е.** Исследование межмолекулярных взаимодействий ксантогенат-ионов с различной длиной углеводородного радикала в модельной флотационной системе.
62. **Куница А.А., Шестаков А.Ф.** Квантово-химическое исследование реакций переноса атома водорода при теломеризации тетрафторэтилена в растворе тетрагидрофурана.
63. **Лепешкин А.Р.** Исследование процесса температуропроводности металлов с учетом электронной проводимости – транспорта электронных пар в поле действия центробежных ускорений и сил.
64. **Лепешкин А.Р.** Моделирование напряженного состояния элементов микро-нано-структурных покрытий на основе диоксида циркония в поле действия центробежных сил.
65. **Литвиненко С.Л., Харанеко А.О., Безбожная Т.В.** Катализируемые комплексами  $\text{Pt(II)}$  реакции иодбензола. Квантово-химический прогноз и эксперимент.

66. **Литвиненко С.Л., Лобачев В.Л., Дятленко Л.М., Туровский Н.А.** Механизмы окисления диметилсульфида пероксидом водорода и пероксиборатами.
67. **Литова О.А., Гаврилова А.В., Кирилин А.Д., Князев С.П., Гордеев Е.Г.** Исследования реакций получения соединений карбодииимидной структуры с помощью методов компьютерной химии.
68. **Лужков В.Б.** Моделирование свободно-радикальных реакций перекисного окисления фенольных антиоксидантов.
69. **Лящук С.Н.** Исследование механизма реакции Коупа в ряду N-оксидов 3-(N-морфолино)-3-R-тиетан-1,1-диоксидов.
70. **Лящук С.Н.** Исследование механизма реакции сульфена с диарилнитроном методом РМб.
71. **Майоров А.В., Крисюк Б.Э., Попов А.А.** Изучение методами квантовой химии влияния сопряженности двойной связи на механизм озонолиза на примере пропилена, акролеина, акриловой кислоты, аллена и акриловой кислоты.
72. **Мамин Э.А., Крисюк Б.Э., Майоров А.В., Попов А.А.** Квантово-химическое исследование влияния деформации двойной связи на механизм реакции озона с монохлорэтиленом.
73. **Мжельская К.В., Чаусов И.С., Мельников П.В., Смекалкин Д.М., Поленов Е.А.** Релейный эффект контактной спиновой плотности на ядрах  $^{19}\text{F}$  во фторалкилированной  $\pi$ -радикальной зарядовой триаде.
74. **Миронов В.А., Боченкова А.В., Немухин А.В.** Теоретическое исследование механизма биосинтеза хромофора зеленого флуоресцентного белка.
75. **Морозов В.А., Дубина Ю.М.** Математическое моделирование динамики заселённости “тёмных” состояний трёхуровневой молекулы при фотоизомеризации.
76. **Муковнин А.А., Таланов В.М.** Моделирование фазовых равновесий, описываемых двухкомпонентным параметром порядка.
77. **Набиев А.М., Ахвердиева Г.А., Годжаев Н.М.** Исследование некоторых аспектов структурно-функциональной организации LVV-геморфина-7.
78. **Неврова О.В., Лобанов А.В., Бржевская О.Н., Дегтярев Е.Н., Комиссаров Г.Г., Неделина О.С.** Исследование методом ЭПР переноса электронов в моделях фотосинтеза.
79. **Никитенко Н.Г., Шестаков А.Ф.** Квантово-химическое моделирование механизма функционализации метана в мягких условиях в присутствии биядерного аквакверцетинового комплекса золота (I).
80. **Никольский С.Н., Тур А.А., Масалимов А.С.** ЭПР-спектроскопия кинетики протолитических реакций аминов, амидов, иминов, имидов и гуанидинов.

81. **Новосадов Б.К., Кирий А.Ю.** Атом неисчерпаемый. Особенности оптического спектра атома.
82. **Огниченко Л.Н, Полищук П.Г., Артеменко А.Г., Клименко К.А. Кузьмин В.Е., Горб Л.Г.** Прогноз температурной зависимости растворимости нитроароматических соединений с помощью QSPR-методологии.
83. **Озиева Е.Х., Мельников П.В., Васильев Е.В., Поленов Е.А., Шапиро Б.И., Ягупольский Л.М.** Электрохимическое восстановление в рядах квазилинейных полиенов и модели граничных уровней.
84. **Панкратов А.Н., Серяпин В.О., Цивилева О.М.** К обоснованию сравнительной биологической активности двух соединений с группой PO(OH)<sub>2</sub>: квантовохимический NBO- и AIM-анализ.
85. **Панкратьев Е.Ю., Тулябаев А.Р., Халилов Л.М.** Эмпирические поправки для расчёта химических сдвигов ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C органических соединений методом GIAO в приближении PBE/3ζ.
86. **Панфилова В.М., Белова Л.О., Кирилин А.Д., Князев С.П.** Компьютерное моделирование реакции образования O-силулетана, содержащего пирозольный фрагмент.
87. **Потешный Д.И., Михайлов И.В.** Применение методов математической обработки спектральных кривых при сопоставлении вычисленных и экспериментальных молекулярных ИК спектров с разрешённой структурой.
88. **Птицын Г.А.** Модели квантового шума и способы их экспериментальной проверки.
89. **Рогачева О.Н., Савватеева-Попова Е.В., Щеголев Б.Ф.** Моделирование конформационных переходов цАМФ-связывающих доменов протеинкиназы A Iα (PKA Iα).
90. **Романов О.Г., Шундалов М.Б.** Динамика туннелирования волнового пакета в многоямном периодическом потенциале.
91. **Рубцова Н.А., Комиссаров Г.Г.** Попытка моделирования некоторых закономерностей интуитивной деятельности человека с помощью теории цепных химических реакций Н.Н. Семенова.
92. **Савостина Л.И., Аминова Р.М.** Квантовохимическое изучение реакций с участием фосфорорганических соединений: моделирование механизма, расчеты структуры молекулярных кластеров и параметров ЯМР.
93. **Солкан В.Н.** Исследование активации молекулярного кислорода в трифторуксусной кислоте.
94. **Солкан В.Н.** Теоретическое исследование ППЭ реакции образования ионов диоксония в серной кислоте.
95. **Солкан В.Н.** Расчет методами MP2 и MP4 термодинамических и активационных параметров для реакции распада закиси азота в цеолите Al-ZSM-5.

96. **Соловьев А.Н., Баранов В.И.** Моделирование изотопического эффекта в электронно-колебательных спектрах стилибена с помощью параметрического метода теории электронно-колебательных спектров.
97. **Таланов В.М.** Моделирование структуры, фазовых состояний и свойств новых материалов на основе симметрично-термодинамических методов теории Ландау.
98. **Таланов В.М., Широков В.Б., Торгашев В.И., Бергер Г.А., Бурцев В.А.** Моделирование фазовых состояний и структур низкосимметричных фаз  $\text{LiCoO}_2$ .
99. **Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.** Структура молекулярных комплексов, присутствующих в растворах  $\text{HF}-(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ .
100. **Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.** Строение дисольватов протона, образующихся в системе  $\text{HCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{HCOOCH}_3$ .
101. **Ткаченко О.Ю., Рогов С.А.** Квантово-химическое исследование взаимного влияния лигандов в структуре  $\eta^3$ -аллильных галогеногидридных комплексов никеля.
102. **Трифонов Н.Ю., Шестаков А.Ф.** Изучение методом функционала плотности структуры и энергии продуктов присоединения  $\text{N}_2$  к  $\text{C}_{60}\text{H}_n^{-m}$ ,  $n=0, 2$  и  $m=0, 2$ .
103. **Туровский Н.А., Пастернак Е.Н., Ракша Е.В., Голубицкая Н.А., Опейда И.А., Гайдамака Т., Букрей А.** Супрамолекулярный катализ бензоатами тетраалкиламмония распада пероксида бензоила. Кинетика и молекулярное моделирование.
104. **Туровцев В.В., Чернова Е.М., Орлов Ю.Д.** Применение «квантовой теории атомов в молекуле» к установлению количественных соотношений «строение-свойство».
105. **Туровцев В.В., Орлов М.Ю., Туровцев Р.В., Орлов Ю.Д.** Изучение внутреннего вращения в гомологических рядах *n*-нитроалканов и *n*-алкантиолов – *goш*-эффект, взаимодействие волчков и переносимость свойств.
106. **Умрейко Д.С., Зажогин А.П., Комяк А.И., Шундалов М.Б.** Моделирование структуры и колебательных спектров комплекса тетрахлорида урана с диметилформамидом.
107. **Хаматгалимов А.Р., Коваленко В.И.** Структура изомеров высшего фуллерена  $\text{C}_{76}$ : причины их стабильности и нестабильности.
108. **Хренова М.Г., Григоренко Б.Л., Немухин А.В.** Электронодонорные свойства зеленого флуоресцентного белка.
109. **Цыганкова И.Г., Женодарова С.М.** Оценка активности ряда производных оксадиазолов как потенциальных противоопухолевых препаратов.
110. **Чаусов И.С., Мжельская К.В., Мельников П.В., Смекалкин Д.М., Поленов Е.А.** Релейный эффект и изоэлектронная инвариантность ферми-

контактного СТВ на ядрах  $^{19}\text{F}$  и  $^{35}\text{Cl}$  в зарядовых триадах фтор- и хлоралкилированных парадизамещенных фениленов.

111. **Чернозатонский Л. А., Квашнин Д.Г.** Моделирование графеновых квантовых точек на лентах графана.
112. **Шульга Д.А., Чупахин В.И., Кудрявцев К.В.** Поиск новых перспективных ингибиторов тромбина при помощи методов молекулярного моделирования.
113. **Щелов В.А., Мельников А.А., Палюлин В.А., Зефирев Н.С.** Компьютерное планирование многостадийного синтеза.
114. **Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г.** Метод теоретического описания взаимосвязей между параметрами водородных мостиков ХНУ ( $X, Y = \text{O}, \text{N}, \text{F}, \text{Cl}$ ).
115. **Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г.** Определение содержания гетероассоциатов разного состава в растворах HF-Solv (Solv =  $(\text{CH}_3)_2\text{CO}, (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{CO}$ ).
116. **Яковенко Ю.Ю., Скворцова М.И.** Модели связи «структура-свойство» органических соединений на основе взвешенных молекулярных графов с подбираемыми весами.
117. **Яковлева А.А., Тен Г.Н., Баранов В.И.** Сравнительный анализ колебательных спектров комплементарной пары гуанин-цитозин в изолированном состоянии и водном растворе.