



Сборник тезисов

<https://chemport.ru/webconference2021/>

26 – 27 апреля 2021

Оглавление

Благодарности	2
Расписание конференции	3
Барьеры и частоты. Некоторые проблемы совместного использования квантовой химии и колебательной спектроскопии в конформационном анализе	6
Approach to automatic composition and visualization of complex energy diagrams	7
Теоретическое изучение эволюции внутривалентных вакансий в катион-радикалах имидазола в водном окружении	8
How to make a planar COFCl molecule chiral?	9
Большая молекулярная база, как платформа для автоматического тестирования квантовомеханических солверов	10
Исследование состояний различной локализации многоконфигурационными методами	11
Многоконфигурационные вычисления и выбор атомного базиса	12
Комбинирование квантово-химических методов для моделирования ионных пар и некоторые проблемы репрезентативности молекулярных моделей	13
Газофазные энтальпии образования шестичленных циклических и полициклических ароматических углеводородов: квантово-химический подход	14
Исследование методами вычислительной химии структуры и динамики комплексов, образованных новыми углеродными материалами с переходными металлами M^0 , их кластерами M_n и металлоорганическими группами ML_n	15
Молекулярное строение производных BODIPY по данным газовой электронографии и квантово-химических расчетов	16
Альдольная конденсация vs катализируемое супероснованиями присоединение кетонов к ацетиленам: теоретическое и экспериментальное исследование	17
Применение расчетных методов для изучения молекулярной структуры бетулина и кристаллической структуры его сольватов	18
Сравнение расчетных методов для исследования молекулярных кристаллов на молекулярном уровне при высоких давлениях	19
Новый подход к заданию температуры в методе молекулярной динамики	20
Trap seeker and digger: the dual identity of the solvated electron in methanol	21
Hypsochromic solvent shift of the charge separation band in ionic complexes of C_{60} and cycloparaphenylenes	22
Surprisal of a quantum state: dynamics, compact representation and coherence effects	23
Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions	24
Resummation of vibrational Rayleigh-Schrödinger perturbation theory divergent series using multi-valued Pade-Hermite approximants: preliminary studies of some triatomic molecules	25
QSAR анализ потенциальных ингибиторов SARS-COV-2	26
Дисперсионное взаимодействие в мультikonфигурационной системе – где правда?	27
Electronic structure of nickel complex of tetrakis(1,2,5-thiadiazole)porphyrizine	28
Список слушателей	29

Благодарим за информационную поддержку



Информационный портал Chemport.ru
<https://chemport.ru/>



Информационный портал QChem.ru
<http://www.qchem.ru/>

Расписание конференции

Время в таблицах дано по Москве (MSK). Ниже дана информация по переводу времени в некоторые другие временные зоны ($MSK \pm n$), отличающиеся от московского времени на $\pm n$ часов.

- MSK+5 (Иркутск).
- MSK+4 (Новосибирск).
- MSK+2 (Екатеринбург, Уфа).
- MSK (Санкт-Петербург, Иваново, Тирасполь, Иерусалим).
- MSK-1 (Лунд, Цюрих, Герона, Карлсруэ, Гамбург).
- MSK-7 (Сантьяго).

26 апреля

09:45–10:00	Вступительное слово
10:00–11:00	Батаев В.А. “Барьеры и частоты. Некоторые проблемы совместного использования квантовой химии и колебательной спектроскопии в конформационном анализе”
11:00–11:30	Генаев А.М. “Approach to automatic composition and visualization of complex energy diagrams”
11:30–11:45	Перерыв
11:45–12:15	Скитневская А.Д. “Теоретическое изучение эволюции внутривалентных вакансий в катион-радикалах имидазола в водном окружении”
12:15–12:45	Tikhonov D.S. “How to make a planar COFCl molecule chiral?”
12:45–13:15	Ибрагимов И.В. “Большая молекулярная база, как платформа для автоматического тестирования квантовомеханических солверов”
13:15–14:00	Перерыв
14:00–15:00	Фрейдзон А.Я. “Исследование состояний различной локализации многоконфигурационными методами”
15:00–15:30	Верязов В. “Многоконфигурационные вычисления и выбор атомного базиса”
15:30–15:45	Перерыв
15:45–16:15	Полынский М.В. “Комбинирование квантово-химических методов для моделирования ионных пар и некоторые проблемы репрезентативности молекулярных моделей”
16:15–16:45	Панкратьев Е.Ю. “Газофазные энтальпии образования шестичленных циклических и полициклических ароматических углеводородов: квантово-химический подход”
16:45–17:15	Кузнецов А. “Исследование структуры и динамики комплексов новых углеродных материалов с переходными металлами M^0, их кластерами M_n и металлоорганическими группами ML_n”
17:15–17:45	Погонин А.Е. “Молекулярное строение производных BODIPY по данным газовой электронографии и квантово-химических расчетов”

27 апреля

10:00–10:30	Орел В.Б. “Альдольная конденсация vs катализируемое супероснованиями присоединение кетонов к ацетиленам: теоретическое и экспериментальное исследование”
10:30–11:00	Скакунова К.Д. “Применение расчетных методов для изучения молекулярной структуры бетулина и кристаллической структуры его сольватов”
11:00–11:30	Рычков Д.А. “Сравнение расчетных методов для исследования молекулярных кристаллов на молекулярном уровне при высоких давлениях”
11:30–11:45	Перерыв
11:45–12:15	Расковалов А.А. “Новый подход к заданию температуры в методе молекулярной динамики”
12:15–12:45	Rybkin V.V. “Trap seeker and digger: the dual identity of the solvated electron in methanol”
12:45–13:15	Stasyuk A.J. “Hypsochromic solvent shift of the charge separation band in ionic complexes of C₆₀ and cycloparaphenylenes”
13:15–14:00	Перерыв
14:00–15:00	Komarova K. “Surprisal of a quantum state: dynamics, compact representation and coherence effects”
15:00–15:30	Novikov A.S. “Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions”
15:30–15:45	Перерыв
15:45–16:15	Dobrolyubov E.O. “Resummation of vibrational Rayleigh-Schrödinger perturbation theory divergent series using multi-valued Pade-Hermite approximants: preliminary studies of some triatomic molecules”
16:15–16:45	Тиньков О.В. “QSAR анализ потенциальных ингибиторов SARS-COV-2”
16:45–17:45	Фрейдзон А.Я. “Памяти Владимира Ивановича Пупышева посвящается”

Барьеры и частоты. Некоторые проблемы совместного использования квантовой химии и колебательной спектроскопии в конформационном анализе

Батаев В.А.^{†а}

^а *Химический факультет МГУ, 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1.*

Доклад посвящен некоторым методическим проблемам, возникающим при совместном использовании в конформационном анализе расчетных данных, полученных методами квантовой химии, и экспериментальных результатов колебательной спектроскопии. Из-за близкого расположения нижних колебательных уровней конформационно нежестких молекул их исследование требует высокой точности как от квантово-химического расчета, так и от эксперимента. Однако традиционные подходы на основе гармонического приближения и даже одномерных сечений поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) могут приводить к существенным ошибкам как при квантово-механическом моделировании, так и интерпретации спектральных данных.

Как правило, доступные экспериментальные данные (энергии колебательных переходов) для подобных систем весьма ограничены и последовательное построение на их основе точных многомерных моделей ППЭ путем решения обратных спектральных задач невозможно. Однако методы квантовой химии допускают моделирование сложных движений ядер вариационным методом на основе прямых расчетов ППЭ. Совместное проведение расчетов и экспериментов позволяет получать дополнительную и более надёжную информацию о молекулярной системе.

Показано, что сложность анализа конформационных превращений связана с особенностями поведения не только оператора потенциальной энергии (формы ППЭ), но и оператора кинетической энергии (например, с существенной зависимостью его матричных элементов от ядерных координат).

Положения доклада проиллюстрированы в основном примерами расчетов и экспериментальных исследований строения и колебательной динамики конформационно нежестких молекул карбонильных соединений в основном и низших возбужденных электронных состояниях.

[†] e-mail: v.a.bataev@gmail.com

Approach to automatic composition and visualization of complex energy diagrams

Генаев А.М.,^{†а} Шернюков А.В.,^а Сальников Г.Е.,^а
^а *Новосибирский институт органической химии.*

В компьютерной химии химическая реакция часто изображается в виде диаграммы, в которой каждый энергетический уровень, соответствующий переходному состоянию (ПС), связан с двумя другими уровнями, отвечающими минимумам на поверхности потенциальной энергии. В случае большого количества ПС составление наглядной энергетической диаграммы вручную может представлять серьезную проблему, связанную с выбором оптимального расположения энергетических уровней, при котором число пересечений связей между ними было бы минимальным (или хотя бы приемлемым). В нашей работе предлагается подход, заключающийся в представлении энергетической диаграммы в виде графа с последующей визуализацией его средствами программы Graphviz. Исходными данными являются файлы стационарных точек в формате XMol xyz, а результатом – svg-файл с диаграммой. Последний при необходимости можно редактировать и затем включить в веб-интерфейс, дающий доступ к 3D-структурам, а также (при наличии соответствующих расчетных данных) позволяющий визуализировать химические сдвиги ЯМР, частоты колебаний и IRC-траектории.

Представленный выше подход иллюстрируется на примере энергетической диаграммы карбокатионов $C_8H_{13}^+$, получающихся в результате последовательных перегруппировок частицы, образующейся при протонировании 1,5-циклооктадиена (COD), см. <http://limor1.nioch.nsc.ru/quant/cyclooctadiene/>.

[†]e-mail: genaev@nioch.nsc.ru

Теоретическое изучение эволюции внутривалентных вакансий в катион-радикалах имидазола в водном окружении

Скитневская А.Д.,^{†a} Григоричева Э.К.,^a Трофимов А.Б.,^{a,b}

^a Иркутский государственный университет, Карла-Маркса, 1, Иркутск, 664003, Россия;

^b Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, ул. Фаворского, 1, Иркутск, 664033, Россия.

Изучение путей и механизмов распада высоковозбужденных состояний органических молекул в присутствии окружения расширяет наше понимание процессов защиты и повреждения биосистем при воздействии на них ионизирующего излучения. С привлечением методов основанных на теории функции Грина (электронного пропагатора) и связанных кластеров для двух термодинамически наиболее устойчивых комплексов имидазол-вода оценена энергетическая возможность распада высоковозбужденных катионных состояний через испускание дополнительного электрона с образованием дикатиона. Для рассматриваемых систем сопоставлены спектры однократной и двукратной ионизации. Конечные дикатионные состояния охарактеризованы как результат (i) процессов Оже с образованием двух вакансий на ионизованном фрагменте, (ii) процессов ICD (intermolecular Coulombic decay) с образованием второй вакансии на соседней молекуле или (iii) процессов ETMD (electron transfer mediated decay), создающих две вакансии на соседней молекуле с полным восстановлением ионизованной первоначально. При удалении электрона с 2s орбитали азота и низших 2s орбиталей углерода в молекуле имидазола помимо канала Оже в присутствии молекулы воды появляется канал ICD, что способствует сохранению целостности гетероцикла, который остается в основном, либо низколежащем возбужденном катионном состоянии. При ионизации 2s орбитали атома кислорода воды вероятен распад с повреждением молекулы гетероцикла, поскольку энергетически открыты только каналы ICD и ETMD. Показано, что ориентация воды критически влияет на природу низших дикатионных состояний в рассматриваемых системах. Работа поддержана грантом Российского Фонда Фундаментальных Исследований (No. 19-03-00947).

Список литературы

1. T. Jahnke et al., *Chem. Rev.* **120**, 11295–11369 (2020).

[†]e-mail: a.skitnevskaya@isu.ru

How to make a planar COFCl molecule chiral?

Tikhonov D.S.,^{†a,b,c} Blech A.,^d Leibscher M.,^e Pérez C.,^{a,b} Schnell M.,^{a,b} Koch C.P.^{d,e}

^a Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Notkestr. 85, D-22607 Hamburg, Germany;

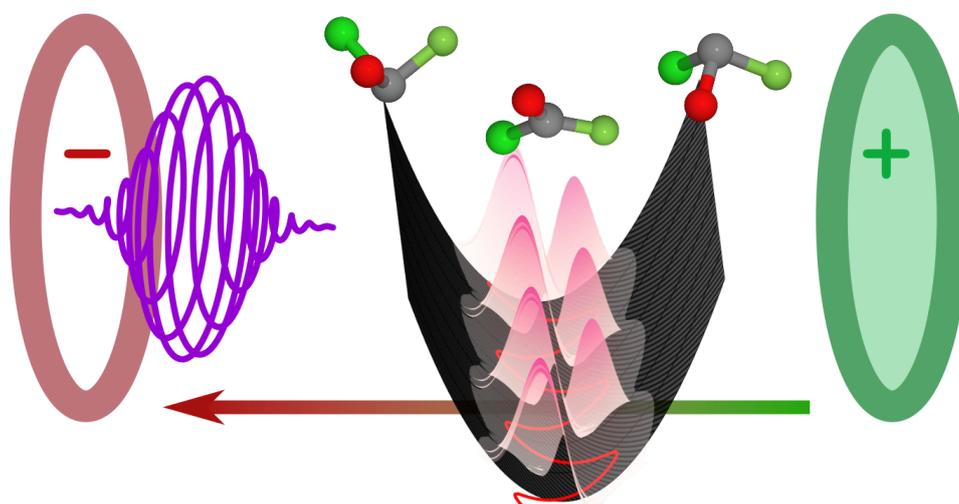
^b Institute of Physical Chemistry, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Max-Eyth-Str. 1, D-24118 Kiel, Germany;

^c Free Moscow University, <https://freemoscow.university/>;

^d Department of Physics, Freie Universität Berlin, Arnimallee 14, 14195 Berlin, Germany;

^e Institut für Physik, Universität Kassel, Heinrich-Plett-Straße 40, 34132 Kassel, Germany;

Chirality is a molecular property, which refers to the existence of molecular structures (enantiomers) that are non-superimposable by only means of rotations, without any addition of mirroring. Many biological functions are dependent on the molecular chirality, for instance, the amino acids in all living organisms exist almost exclusively in the L-form. Therefore it is really important to understand the mechanisms of absolute asymmetric synthesis (AAS) [1-3], i.e. of methods of generating an enantiomeric excess in the achiral or racemic systems without usage of any enantiopure reagents or catalysts.



In this talk we will describe a possible experiment, where a measurable enantiomeric excess will be induced in a COFCl vapor. This extremely toxic molecule is planar in its equilibrium structure, and thus is achiral. The experiment should be performed in an ultrafast pump-probe fashion. The chirality would be induced by an excitation of an out-of-plane vibration in COFCl by resonant two-photon process with a femtosecond circularly polarized laser pulse in the presence of static electric field (see Figure above). The probing of the oscillating enantiomeric excess would be done by an ultrafast photoelectron circular dichroism (PECD) measurement [4]. We will discuss the possibility of the experiment, taking into a consideration pump and probe efficiency, and also the lifetime of the enantiopure wavepacket due to rotational decoherence and intramolecular vibrational energy redistribution (IVR).

Список литературы

1. B.L. Feringa et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **38**, 3418–3438 (1999).
2. D.V. Zhdanov et al., *Laser Physics* **20**, 107–118 (2010).
3. S. Bychkov et al., *J. Exp. Theor. Phys.* **93**, 24 (2001).
4. C. Lux et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 5001-5005 (2012).

[†]e-mail: denis.tikhonov@desy.de

Большая молекулярная база, как платформа для автоматического тестирования квантовомеханических солверов

Ибрагимов И.В.,^{†a}

^a *Elegant Mathematics Ltd, Hanauer Mühle 2, 66564 Ottweiler-Fürth, Germany.*

В настоящее время имеется множество уже открытых и изученных веществ, на основании данных из PubChem[1], сейчас известно около 271 миллиона веществ. Для большинства из них имеется большая потребность в предсказании их молекулярной структуры и свойств. Даже построение молекулярной структуры и перечисления нескольких наиболее устойчивых конформеров для всех этих молекул является вычислительно сложной задачей, требующей большие объемы памяти для хранения таких структур.

В докладе будет представлена новая система, которая только недавно начала развиваться в нашей компании, для удобного поиска и описания известных в настоящее время молекулярных структур и их пространственных конформеров, в которой в дальнейшем будут добавляться как расчеты конформеров на основе методов молекулярной механики, так и на основе *ab-initio* методов.

Эта система в настоящий момент использует граф молекул из базы PubChem[1], так, что имеется около 50 миллионов молекулярных графов и, для каждого такого графа проводится вычисление пространственной геометрии и конформаций. В настоящий момент наша система содержит уже около 900 миллионов конформаций.

Наличие такой системы позволит в автоматическом режиме тестировать квантовомеханические солверы, так, например, мы сейчас достигаем вычисления нескольких наиболее устойчивых конформеров для средней по размеру молекулярной структуры примерно за 2 секунды с учетом небольшого суперкомпьютера с 24 ТФлоп/с пиковой производительности и эти результаты хорошо согласуются с теми данными, которые известны в PubChem.

Наша фирма планирует всегда бесплатно предоставлять результаты численного моделирования и максимально удобный поиск по таким структурам в нашей молекулярной базе с нашего сайта.

Список литературы

1. Kim S, et al. *Nucleic Acids Res.* **49**, D1388–D1395 (2021).

[†]e-mail: ii@elegant-mathematics.com

Исследование состояний различной локализации многоконфигурационными методами

Фрейдзон А.Я.^{†a,b}

^a Центр Фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, ул. Новаторов 7а;

^b НИЯУ МИФИ, Москва, Каширское ш. 31;

Многие процессы в органической электронике и фотонике связаны с переходами между состояниями с различной локализацией заряда или возбуждения. Это, в частности, миграция квазичастиц (электронов, дырок, экситонов), рекомбинация и разделение зарядов в электроактивных и электролюминесцентных материалах. Процессы переноса энергии и дезактивации возбуждения также связаны с состояниями различной локализации. Переходы между состояниями различной локализации с необходимостью включают движение ядер, или молекулярную реорганизацию, что предполагает наличие нескольких минимумов на потенциальной поверхности. Это требует использования многоконфигурационной квантовой химии, поскольку метод функционала плотности не вполне адекватно передает энергетику состояний с переносом заряда. Будут рассмотрены примеры систем с различной локализацией заряда или возбуждения и процессы миграции квазичастицы и релаксации энергии в них.

Список литературы

1. A. Y. Freidzon et al., *Int. J. Quantum Chem.* **112**, 3059 (2012).
2. A. Ya. Freidzon et al., *J. Phys. Chem. C* **119**, 26817 (2015).
3. V. V. Volchkov et al., *Photochem. Photobiol. Sci.* **18**, 232 (2019).
4. I. D. Krysko et al., *J. Phys. Chem. C* **123**, 11171 (2019).
5. A. Ya. Freidzon et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 3539 (2020).
6. A. Ya. Freidzon et al., *J. Phys. Chem. A* **124**, 7927 (2020).

[†]e-mail: freidzon.sanya@gmail.com

Многоконфигурационные вычисления и выбор атомного базиса

Верязов Валера (Valera Veryazov)^{†a}

^a Лундский Университет, Химический центр, Теоретическая химия, Лунд, 22100, Швеция.

Рассуждая о точных методах расчета электронной структуры мы чаще всего обращаем исключительное внимание структуру Гамильтониана. Выбор атомного базиса рассматривается как не особо важная и рутинная проблема. Степенная зависимость времени расчета от размеров базиса часто приводит к достаточно неосмотрительному выбору базиса для расчетов.

Наша группа предложила новые базисные наборы из класса Атомные Натуральные Орбитали ANO-XS [1] и ANO-R [2] для расчетов любых систем, включая соединения с тяжелыми элементами, где учет релятивистских эффектов является необходимым.

Тестирование этих базисов [3] вскрыло ряд интересных проблем, связанных с использованием атомных базисов в многоконфигурационных расчетах. В частности, недостаток стандартных тестов для такого рода расчетов. К особым случаям относятся и системы с необычной электронной структурой.

Список литературы

1. P-O. Widmark et al., *J. Chem. Phys.* **149**, 194102 (2018).
2. J.P. Zobel et al., *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 278–294 (2019).
3. E.D.Larsson et al. (submitted to JCP).

[†]e-mail: valera.veryazov@teokem.lu.se

Комбинирование квантово-химических методов для моделирования ионных пар и некоторые проблемы репрезентативности молекулярных моделей

Полынский М.В.,^{†a,b} Сапова М.Д.,^c Анаников В.П.^{b,a}

^a ФГБОУ ВО “Санкт-Петербургский государственный университет”,

Россия, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, д. 26;

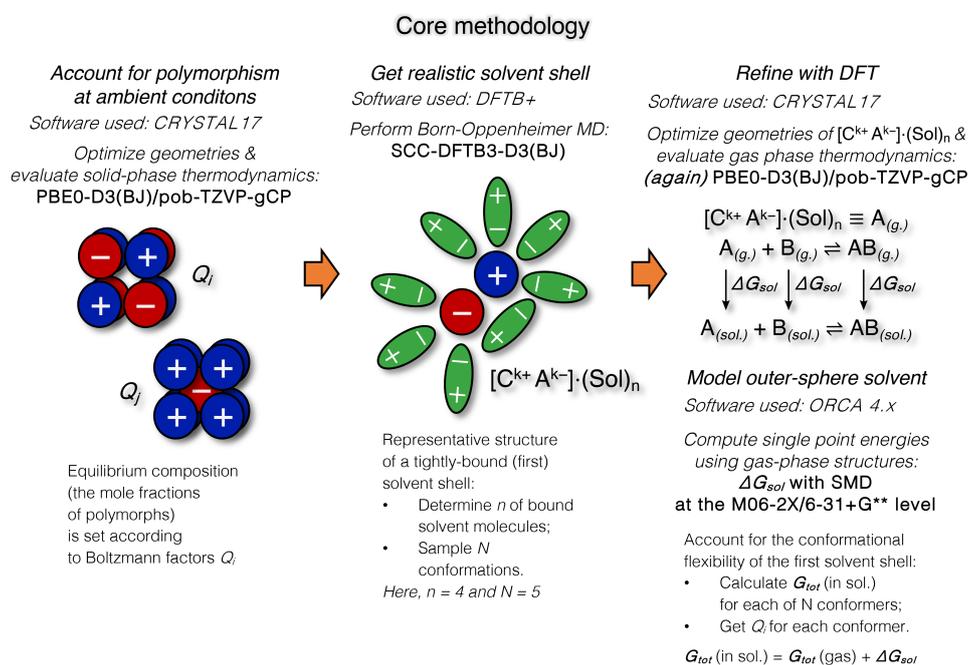
^b ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,

Россия, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47;

^c ООО “Международный центр квантовой оптики и квантовых технологий”,

Россия, 121205, г. Москва, территория инновационного центра “Сколково”, Большой бульвар, дом 30, стр. 1;

Кристаллический CaC₂ нерастворим в органических растворителях. Его реакционной способности в органических реакциях способствует образование сольватированных ацетиленид-анионов C≡C²⁻ и HC≡C⁻.



Будет рассказано о комбинировании борн-оппенгеймеровской МД и статических DFT-расчетов в новом подходе к моделированию ионных пар в координирующих растворителях [1]. В результате применения предлагаемого подхода мы сформулировали набор рекомендаций для химиков-практиков по разработке новых, более «зеленых» синтетических методик, а также продемонстрировали ключевую роль частичного гидролиза в активации CaC₂ в органических реакциях.

Список литературы

1. M.V. Polynski et al., *Chem. Sci.* **11**, 13102–13112 (2020).

[†]e-mail: mpol@ioc.ac.ru

Газофазные энтальпии образования шестичленных циклических и полициклических ароматических углеводородов: квантово-химический подход

Панкратьев Е.Ю.,^{†a,b} Хатымов Р.В.^{a,c}

^a Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, 151, пр. Октября, г. Уфа, 450075, Россия;

^b Уфимский государственный нефтяной технический университет, 1, ул. Космонавтов, г. Уфа, 450064, Россия;

^c Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, 9, Миусская площадь, г. Москва, 125047, Россия.

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) служат структурной основой соединений, встречающихся в живой природе, обнаруживаются в межзвездном пространстве и в объектах окружающей среды, известны своей токсичностью, мутагенной и канцерогенной активностью. Варьирующиеся в широких пределах размерно- и структурнозависимые свойства молекул ПАУ предоставляют богатый выбор материалов для бурно развивающейся области органической электроники и фотоники. Для оценки относительной стабильности, реакционной способности и других физико-химических свойств важным молекулярным параметром служит энтальпия образования ($\Delta_f H^\circ$) [1-2]. Для оценки $\Delta_f H^\circ$ ароматических углеводородов проведено тестирование ряда *ab initio* методов и функционалов плотности, а также их комбинаций и композитных методов. Предложена методика расчёта стандартной газофазной энтальпии образования, основанная на законе Гесса (на основе экспериментальных данных C_4H_4) в сочетании с квантово-химическим методом RI-MP2/ Λ 1//PBE/ Λ 2. По этой методике получены расчетные энтальпии образования для 31 циклических, полициклических ката- и пери-конденсированных ПАУ и некоторых их метилпроизводных (от C_6H_6 до $\text{C}_{24}\text{H}_{12}$), а также фуллеренов C_{60} и C_{70} [3]. Сравнение с найденными в литературе экспериментальными данными показало, что для молекул малого размера данная методика воспроизводит энтальпию образования с термодинамической точностью (± 1 ккал/моль), а с увеличением размера молекул ошибка возрастает, но, за редким исключением, остается в пределах 3 ккал/моль. Выявлены закономерности в величинах энтальпий образования в изомерных и гомологических рядах ката-конденсированных линейных и изогнутых молекул.

Список литературы

1. Joanna Yu et al., *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 12685–12700 (2004).
2. Панкратьев Е.Ю. и др., *Известия Уфимского научного центра РАН* **2**, 26–37 (2019).
3. Pankratyev E.Yu. et al., *Physica E.* **101**, 265–272 (2018).

[†]e-mail: evgeniy@pankratye.ru

Исследование методами вычислительной химии структуры и динамики комплексов, образованных новыми углеродными материалами с переходными металлами M^0 , их кластерами M_n и металлоорганическими группами ML_n

Кузнецов А.,^{†a} Опруненко Ю.Ф.,^b Глориезов И.П.^b

^a Химический факультет, Технический университет им. Федерико Санта Мариа,
ул. Санта Мариа 6400, 7660251, Сантьяго, Чили;

^b Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,
Ленинские горы 1, стр. 3, 119991, Москва, Российская Федерация.

Новые углеродные материалы (графены, дефектные графены, углеродные нанотрубки, фуллерены) и их комплексы с переходными металлами представляют огромный интерес для исследователей. Понимание их структурных особенностей, динамического поведения и других свойств даёт возможность их целевого использования в качестве материалов будущего для электроники и оптоэлектроники, при создании сверхпроводящих материалов, в катализе, медицине, сенсорах на отравляющие соединения, материалах для хранения водорода, сверхпрочных материалах и пр. Пока физико-химическое исследование таких бертоллидов представляет определенные трудности.

Используя методы функционала плотности, мы изучили взаимодействие нульвалентных металлов 8 группы (Fe, Ru, Os) с моделями графена разного размера и определили структуры образованных комплексов и активационные барьеры их η^6, η^6 -металлотропных гаптотропных перегруппировок (МГП). Мы установили механизм внутримолекулярных η^6, η^6 -МГП для комплексов графена с группой MSp^+ ($M = Fe, Ru, Os$), активационные барьеры которых оказались заметно выше.

Мы изучили координацию металлов подгруппы железа с дефектными графенами (одиночна вакансия и дефект Стоуна-Уэлса (SV и SW) и показали возможности применения комплексов (графен)-SV-M в качестве катализаторов гидрирования ацетилена до этилена (Ru) и дожига CO до CO₂, а также возможность использования этих комплексов в качестве сенсоров для токсичных промышленных газов (Fe) и в качестве противоопухолевых препаратов (Ru, Os). Показана принципиальная применимость наших подходов к исследованию новых углеродных материалов с ограниченной симметрией: комплексов графенов и дефектных графенов и т.д.

Список литературы

1. A.V. Krashennnikov et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 126807 (2009).
2. D. Grasseschi et al., *Coord. Chem. Rev.* **422**, 213469 (2020).
3. C. Cao et al., *Phys. Rev. B* **81**, 205424 (2010).
4. I.P. Glorizov et al., *J. Phys. Chem. A* **125**, 366–375 (2021).

[†]e-mail: aleksey.kuznetsov@usm.cl

Молекулярное строение производных BODIPY по данным газовой электронографии и квантово-химических расчетов

Погонин А.Е.,^{†а} Курочкин И.Ю.,^а Постникова Д.А.,^а Шагурин А.Ю.,^а

^а 1. Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Шереметевский пр. 7.

В рамках настоящей работы проведены квантово-химические расчеты ряда производных BODIPY. Строение молекулы 8-фенил-BODIPY также определено методом газовой электронографии. Расчеты оптимизации геометрического строения и гармонических частот колебаний данной молекулы проведены на уровне теории B3LYP/сс-pVTZ. Молекула 8-фенил-BODIPY обладает точечной группой симметрии C_2 . Угол поворота фенильной группы составляет $\tau = 58^\circ$ (B3LYP/сс-pVTZ).

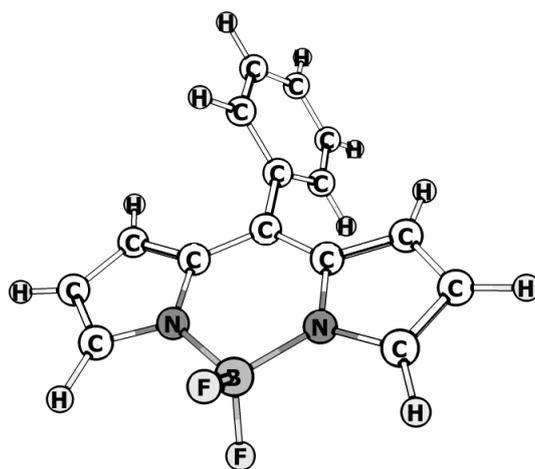


Рис. 1: Модель молекулы 8-фенил-BODIPY

МНК-анализ проведен с помощью модифицированной версии программы Unex [1]. Полученные структурные параметры находятся в хорошем согласии с расчетными. Для оценки нежесткости молекулы рассчитаны функции искажения посредством сканирования торсионных углов поворота фенильной группы и выхода атома бора из плоскости молекулы при оптимизации всех остальных геометрических параметров.

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации (проект МК-5965.2021.1.3).

Список литературы

1. Y. V. Vishnevskiy, UNEX version 1.6, (2019). <http://unexprog.org>.

[†]e-mail: pogonin@isuct.ru

Альдольная конденсация vs катализируемое супероснованиями присоединение кетонов к ацетиленам: теоретическое и экспериментальное исследование

Орел В.Б.,^{†а}

^а Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия.

В суперосновных средах создаются потенциально благоприятные условия для конденсации кетонов, в том числе для реакции автоконденсации. Процессы автоконденсации могут сопровождать другие осуществляемые в этих средах реакции с участием кетонов. В частности, это недавно обнаруженные промотируемые супероснованиями реакции сборки нескольких эквивалентов ацетиленов и кетонов с образованием синтетически и фармацевтически ценных карбо- и гетероциклов [1].

Механизм альдольной конденсации кетонов в суперосновной среде KOH/DMCO был исследован методом B2PLYP(D2)/6-311+G**//B3LYP/6-31+G* + PCM. Учет суперосновного окружения осуществлялся на уровне моносолевой модели с явным включением в расчет комплекса KOH·DMSO и оптимизацией геометрии в рамках модели PCM [2].

Показано, что взаимодействие трех молекул кетона, приводящее к образованию циклогекс-2-еноновой структуры (например, изофорона $\Delta G = -22.3$ ккал/моль), является термодинамически более выгодным, чем взаимодействие 2–4 молекул кетона с образованием линейных продуктов. Формирование продуктов изофоронового строения требует преодоления невысоких барьеров активации $\Delta G^\ddagger < 16$ ккал/моль, что может затруднять инициируемые C-винилированием ($\Delta G^\ddagger > 20$ ккал/моль) каскадные реакции кетонов с ацетиленами. В частности, кинетически более предпочтительные процессы автоконденсации ацетона и автовинилирования пропаргилового спирта (образующегося из ацетона и ацетилена) являются причинами, по которым взаимодействие ацетона с ацетиленом не приводит к продуктам каскадныхборок. Преимущественное образование продуктов этих побочных реакций подтверждено экспериментально.

Работа выполнена в рамках задания Минобрнауки РФ FZZE-2020-0025.

Список литературы

1. В.А. Trofimov et al., *Acc. Chem. Res.* **51**, 1117–1130 (2018).
2. N.M. Vitkovskaya et al., *Int. J. Quantum Chem.* **120**, 26152 (2020).

[†]e-mail: orely@isu.ru

Применение расчетных методов для изучения молекулярной структуры бетулина и кристаллической структуры его сольватов

Скакунова К.Д.,^{†a,b} Рычков Д.А.^{a,b}

^a Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, ул. Пирогова, д. 1;

^b Институт химии твердого тела и механохимии, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе 18.

Большинство известных веществ имеют низкую растворимость и биодоступность. Существуют способы изменить растворимость, например: изменение кристаллической формы (образование солей, сокристаллов, комплексов) или изменение самой молекулы. Различие кристаллических форм может оказывать влияние на свойства соединения в твердом состоянии (растворимость, реакционная способность, стабильность, сжимаемость и др.) [1,2]. Поэтому понимание исследуемой формы является важным при разработке кристаллических материалов.

Объект исследования – бетулин (3 β ,28-дигидрокси-20(29)-лупен) – пентациклический тритерпеновый спирт люпанового типа, получаемый из коры березы. Обладает биологической активностью как противовирусное, противовоспалительное, противоопухолевое средство. Однако отсутствует информация о кристаллической структуре, а сольватоморфы описаны исключительно кристаллографически. Цель работы – исследование молекулярной и кристаллической структуры бетулина и его соединений расчетными методами, систематизация ранее полученных данных о сольватоморфах и их интерпретация с точки зрения энергий взаимодействия.

В работе проведен сравнительный анализ известных структур сольватов бетулина, проанализированы торсионные углы молекулы в сольватных формах. Произведен расчет оптимизированной структуры молекулы в вакууме, построены энергетические профили. На основании проведенных работ выявлено девять возможных конформеров молекулы, из которых два реализуются в известных структурах. Выполнен статистический анализ методом построения карт полного взаимодействия (FIM). Рассчитаны энергии связей и кристаллических решеток известных структур бетулина. Выполнен кристаллоструктурный анализ с использованием энергетических характеристик. Проанализированы данные о природе образования существующих форм, предложены классы органических веществ для получения новых форм.

Список литературы

1. Т.Н. Дребущак et al., *Журнал структурной химии* **61**, 1328–1334 (2020).
2. D. Yang et al., *J. Pharm. Sci.* **105**, 1867–1873 (2016).
3. S. Boryczka et al., *J. Chem. Crystallogr.* **42**, 345–351 (2012)

[†]e-mail: skakunova.kseniya@mail.ru

Сравнение расчетных методов для исследования молекулярных кристаллов на молекулярном уровне при высоких давлениях

Рычков Д.А.^{†a,b}

^a Новосибирский государственный университет (НГУ), г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2.;

^b Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18.

The study of the high-pressure behavior of molecular crystals helps find limits of their stability, as well as obtain previously unknown new phases. This may result in the creation of new materials and their forms for a variety of applications: pharmaceuticals, optoelectronics, etc. Nevertheless, until recently, there was no practical unified scheme for high-pressure studies of organic molecules, paying close attention to various inter- and intramolecular interactions [1]. In this work, we compare different computational methods for the high-pressure research of molecular crystals in terms of the energy of particular interactions [2]. Tolazamide polymorphs are taken as a representative system [3-4]. It is shown that not only “structure-forming” interactions, e.g. H-bonds and stacking interactions, but also multiple van der Waals interactions should be taken into account. Moreover, we compare two different concepts for studying particular H-bonds in terms of absolute and relative energies, showing their importance in understanding the high-pressure behavior of tolazamide polymorphs. Finally, several important details about the high-pressure research of organic crystals at a molecular level by computational methods are formulated.

Список литературы

1. D.A. Rychkov, *Crystals* **10**, 81 (2020).
2. A.Y. Fedorov et al., *J. Struct. Chem.* **61**, 1356–1366 (2020).
3. A.Y. Fedorov et al., *CrystEngComm* **19**, 2243–2252 (2017).
4. A.Y. Fedorov et al., *Acta Crystallogr. Sect. C Struct. Chem.* **75**, 598–608 (2019).

[†]e-mail: rychkov.dennis@gmail.com

Новый подход к заданию температуры в методе молекулярной динамики

Расковалов А.А.,^{†а}

^а *Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Российская Федерация, 620066, г. Екатеринбург, ул. С.Ковалевской, 22/ ул. Академическая, 20.*

Одним из наиболее широкоиспользуемых методов моделирования микроскопического поведения системы является метод молекулярной динамики (МД). Поскольку поведение микросистемы зависит от температуры, её необходимо каким-либо образом задавать. МД унаследовала определение температуры из молекулярно-кинетической теории (МКТ), согласно которой, температура – есть величина, пропорциональная среднекинетической энергии частиц. Существуют различные алгоритмы-термостаты [1-2], которые, следуя этому определению, масштабируют скорости частиц. Однако, экспериментальные факты заставляют усомниться в том, что температура сводится к среднекинетической энергии частиц.

В данной работе предложен другой подход к термостатированию системы, через спектр теплового излучения. Известно, что все тела излучают и дисперсия излучаемых фотонов по энергиям однозначно характеризуется температурой (формула Планка). Предложенный алгоритм термостатирования заключается в виртуальном поглощении/испускании фотонов атомами вещества, сопровождающимся изменением импульса и энергии последних. Программное обеспечение для моделирования разработано на основе параллельной CUDA-версии программы azTotMD [3]. Благодаря переносу вычислений на графические процессоры удалось произвести моделирование с десятками тысяч частиц на персональном компьютере.

Результаты численных экспериментов на системе 40'000 атомов показали, что предложенный алгоритм термостатирования позволяет разгонять/замедлять атомы, в зависимости от текущего состояния системы и целевой температуры. Кроме того, независимо от начального распределения скоростей (в том числе однородного), конечное распределение приобретает вид похожий на распределение Максвелла, что является определенным успехом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-03-00897 А.

Список литературы

1. H.J.C. Berendsen et al., *J. Chem. Phys.* **81**, 3684–3690 (1984).
2. W.G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695–1697 (1985).
3. A.A. Raskovalov, *SoftwareX* **10**, 100233 (2019).

[†]e-mail: other@e1.ru

Trap seeker and digger: the dual identity of the solvated electron in methanol

Rybkin V.V.,^{†a}

^a *Department of Chemistry, University of Zurich, Switzerland.*

The structure of the solvated electron in methanol is less studied but more complicated than the one of the hydrated electron. In this condensed-phase first principles molecular dynamics study we reveal the nature of the recently discovered shallow and deep trap states of the excess electron and suggest a more complex picture including four bound cavity states classified by the number of the hydroxy-groups coordinated to the electron, their binding energy gradually increasing with the OH-coordination. The initial shallow bound states are formed via a transient diffusion mechanism, in a trap-seeking fashion, whereas, deeper bound states are formed via a slower methanol molecules reorientation. Despite apparent similarity of the absorption spectrum of the solvated electron in methanol to this in water, the origin of the absorption maximum is drastically different. The previously assumed model of hydrogenic transitions (s-p etc.) as is the case in water does not hold for methanol. Instead, the main bands arise due to the charge-transfer states, promoting the excess electron to the nearby cavity, naturally abundant in this solvent. Instead, we propose a simple double-well model able to qualitatively describe electronic transitions of the solvated electron in methanol.

[†]e-mail: vladimir.rybkin@chem.uzh.ch

Hypsochromic solvent shift of the charge separation band in ionic complexes of C₆₀ and cycloparaphenylenes

Stasyuk A.J., ^{†a}

^a *Institut de Química Computacional and Departament de Química, Universitat de Girona, C/ Maria Aurèlia Capmany 69, 17003 Girona, Spain.*

Donor-acceptor dyads with C₆₀ as electron acceptor and a cycloparaphenylene (CPP) unit assembled via non-covalent interactions as electron donor have been reported in the literature. In our work, we study computationally using the DFT/TDDFT approach the photoinduced electron transfer (PET) in CPP-based donor-acceptor [10]CPP⊃C₆₀ and [10]CPP⊃Li⁺@C₆₀ supramolecules. As it is well known, the energy of charge separated (CS) states generated in donor-acceptor systems by PET are significantly stabilized by the polar environment. Based on the analysis of initial and final states after PET in various fullerene complexes, we find a system, [10]CPP⊃Li⁺@C₆₀, that shows anomalous solvent effects, *i.e.*, destabilization of charge separated states by the polar medium. To our knowledge, this is the first example of fullerene based systems where a hypsochromic shift of the CS band is demonstrated.

To explore this anomalous effect, we study inclusion complexes [10]CPP⊃Li⁺@C₆₀-MP, [10]CPP⊃C₆₀-MPH⁺, and [10]CPP⊃C₆₀-PPyMe⁺ formed by fulleropyrrolidine derivatives and [10]CPP. We show that the introduction of a positively charged fragment into fullerene stabilizes CT states that become the lowest-lying excited states. The distance of the charged fragment to the center of the fullerenic cage and its accessibility to the solvent determine the strength of the hypsochromic shift.

[†]e-mail: antony.stasuk@gmail.com

Surprisal of a quantum state: dynamics, compact representation and coherence effects

Ksenia Komarova^{†a}

^a Fritz-Haber Center for Molecular Dynamics, The Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Israel.

The state of a quantum mechanical system, pure or mixed, is described by a density operator. Surprisal – the logarithm of the density matrix – follows the same unitary evolution as the density operator. The maximal entropy formalism provides an explicit form of the density as an exponential function of a set of operators, whose observables are given. It allows to describe the state of the system explicitly via our knowledge about its observables [1-4]. The most well-known example of such a function is Boltzmann distribution, $\hat{\rho} = Z^{-1} \exp(-\beta \hat{H})$, where the state of the system is defined by only one observable – energy. In general, there can be more than one operator that contributes to the density and these operators do not necessarily commute. Hence, the representation of the surprisal, logarithm of the exponential function, is a simpler construct than the density itself and allows more compact description of a quantum state.

I will focus on a simple example of a non-adiabatic dynamics–non-radiative decay between two electronic states due to diabatic coupling, modeled after pyrazine [5]. In this example the electronic and nuclear degrees of freedom are coupled and coherence effects are prominent.

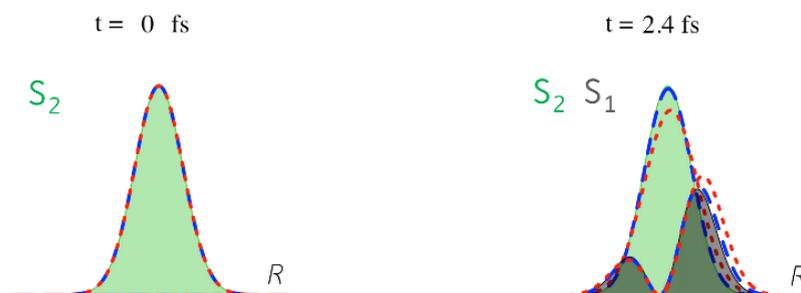


Рис. 1: The wavepacket population on the upper electronic state is plotted in light green, and in dark grey on the lower electronic state as a function of normal mode nuclear coordinate, R . The panels are computed for increasing time values as indicated. Shown also are two approximate computations where the surprisal is expanded in a minimal basis of dominant constraints $\{\hat{\mathbb{I}}_N, \hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger \hat{a}\}$, red dotted curve, and in an extended set $\{\hat{\mathbb{I}}_N, \hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{a}^2, (\hat{a}^\dagger)^2, \hat{a}^\dagger \hat{a}\}$, blue dashed curve.

Список литературы

1. E. T. Jaynes, *Phys. Rev.* **106**, 620 (1957).
2. E. H. Wichmann, *J. Math. Phys.* **4**, 884 (1963).
3. R. D. Levine, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **29**, 59 (1978).
4. Y. Alhassid et al., *Phys. Rev. A* **18**, 89 (1978).
5. R. Schneider et al., *Chem. Phys. Lett.* **150**, 235 (1988).
6. K. Komarova et al., *J. Chem. Phys.* **153**, 214105 (2020).

[†]e-mail: kgvladi@gmail.com

Computer modeling in organometallic and coordination chemistry: reactivity and non-covalent interactions

Novikov A.S. ^{†a}

^a *Saint Petersburg State University, Universitetskaya Nab. 7/9, Saint Petersburg 199034, Russian Federation.*

This report is devoted to the discussion of the results of my research in the field of theoretical studies of the mechanisms of cycloaddition and nucleophilic addition reactions (pathways to the synthesis of chemical compounds important for pharmaceutical and medicinal chemistry), as well as the processes of catalysis of the generation of OH• radicals and epoxidation (industrially significant processes). This report is also devoted to the presentation and discussion of the results of my research in the field of theoretical studies of various non-covalent interactions in chemical compounds.

For my publications see Scopus ID: 50262902200 and Web of Science ResearcherID: L-5001-2015.

I am grateful to the Russian Science Foundation (RSF) for supporting my research in the framework of project No. 19-73-00001.

[†]e-mail: a.s.novikov@spbu.ru

Resummation of vibrational Rayleigh-Schrödinger perturbation theory divergent series using multi-valued Pade-Hermite approximants: preliminary studies of some triatomic molecules

Dobrolyubov E.O.,^{†a} Krasnoshchekov S.V.,^a Chang X.^a

^a 1. Chemistry Department, Lomonosov Moscow State University, Leninskiye Gory 1-3, Moscow, 119899, Russian Federation.

A quantitative study of vibrational resonance phenomena of some triatomic molecules was performed. For their ~ 100 lower vibrational energy levels we applied resummation techniques of high-order vibrational Rayleigh-Schrödinger perturbation theory (RSPT) divergent series and compared with the matrix configurational interaction (VCI) method. Resummation with quartic 40-th degree diagonal approximants of a subset of low-lying states restored their correct energies. Considering the perturbation parameter λ as a complex variable, the branch points of solutions were found as roots of the discriminant polynomials. The coincidence of the dominant branch points for pairs of states according to the Katz theorem and the condition $|\lambda| \leq 1$ revealed the resonance couplings. The block-diagonal polyad structure of the studied states was reconstructed and the form of the polyad quantum number was determined.

Список литературы

1. S. Krasnoshchekov et al., *Opt. Spectr.* **128**, 1927–1938 (2020).
2. S. Krasnoshchekov et al., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **268**, 107620 (2021).

[†]e-mail: dobrolyubov1@gmail.com

QSAR анализ потенциальных ингибиторов SARS-COV-2

Тиньков О.В.,^{†a,b} Григорьева Л.Д.,^c Григорьев В.Ю.^d

^a Приднестровский Государственный Университет им. Т.Г. Шевченко,
3300, Молдова, Приднестровье, Тирасполь, ул. Мира, 33;

^b Военный институт Министерства обороны им. генерал-лейтенанта А.И. Лебеда,
3300, Молдова, Приднестровье, Тирасполь, Гоголя, 2“В”;

^c Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Россия, Москва, Ленинские горы, 1, стр.51;

^d Институт физиологически активных веществ Российской академии наук,
142432, Московская область, Черноголовка, Северный пр. 1.

Согласно недавно проведенным исследованиям, главная протеаза Mpro вируса SARS-CoV-2 эволюционно консервативна и не претерпела значительных изменений по сравнению с главной протеазой Mpro вируса SARS-CoV. В условиях нарастающей эпидемии выглядят логичными дальнейшие исследования ингибиторов главной протеазы Mpro вируса SARS-CoV для борьбы с COVID-19. В ходе исследования с применением симплексных, фрактальных, HYBOT дескрипторов, методов частичных наименьших квадратов, случайного леса, опорных векторов, градиентного бустинга, а также интернет-платформы OCHEM (<https://ochem.eu>), в которой реализованы различные типы молекулярных дескрипторов и методы машинного обучения, построены удовлетворительные QSAR модели. Для полученных моделей была проведена структурная интерпретация, позволившая выделить молекулярные фрагменты, повышающие и понижающие активность ингибиторов SARS-CoV. Результаты структурной интерпретации были использованы для рационального молекулярного дизайна потенциальных ингибиторов SARS-CoV-2. Для пяти сконструированных соединений было проведена оценка ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity - Абсорбция, Распределение, Метаболизм, Выделение, Токсичность) свойств, соответствие правилам Липински, присутствие PAINS фрагментов, синтетическая доступность, что крайне важно для предложенных, но еще не синтезированных соединений. Полученные QSAR модели были также использованы для виртуального скрининга 2087 одобренных FDA лекарственных средств, по результатам которого выделено 10 веществ, которые могут быть рекомендованы для реперофилирования в качестве лекарств против новой коронавирусной инфекции.

Список литературы

1. Y.W.Chen et al., *F1000Research* **9**, 129 (2020).
2. P.Polishchuk et al., *J. Chem. Inf. Model.* **56**, 1455–1469 (2016).

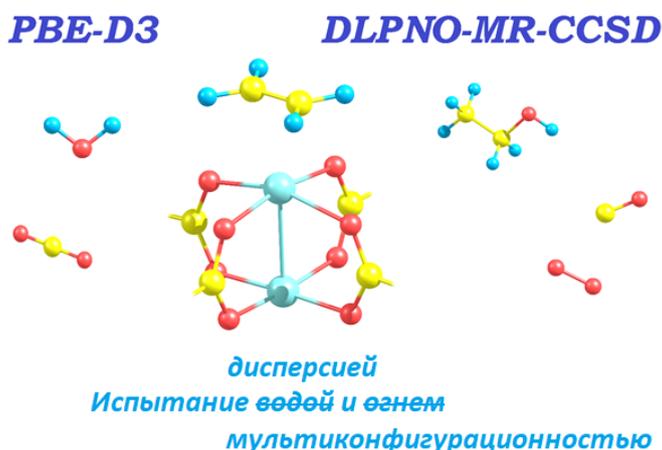
[†]e-mail: oleg.tinkov.chem@mail.ru

Дисперсионное взаимодействие в мультikonфигурационной системе – где правда?

Шарапа Д.И.,^{†a} Крстич М.^b

^a 1. Институт исследования и технологии катализа, Технологический Институт Карлсруэ, D-76344, Эггенштайн-Леопольдсхафен, Германия;

^b 2. Институт теоретической физики твердого тела, Технологический Институт Карлсруэ, D-76131, Карлсруэ, Германия.



В последнее десятилетие было разработано множество методов, позволивших корректно описывать нековалентное взаимодействие: дисперсионные поправки к теории функционала плотности (D-поправки Гримме, NL (например VV10), TS, dDsC и другие), параметризация функционалов с учетом дисперсии (функционалы Трулара), смешивание DFT и MP2 (даблгибридные функционалы), ACFD и RPA подходы, качественно отличный SAPT-подход, варианты с использованием дорогих пост-хартрифовских методов базирующиеся как на теории возмущений Меллера-Плессета (SCS-MP2, MP2.5, MP2.X), так и на аппроксимациях теории связанных кластеров (в первую очередь DLPNO-CCSD). Одновременно, медленно, но верно, продолжается развитие совсем другой области квантовой химии – многодетерминантных методов. Однако можем ли мы корректно описать дисперсионное взаимодействие в мультikonфигурационной системе? Этот вопрос не столь искусственен, как может показаться на первый взгляд: например, каталитические процессы очень часто протекают на комплексах переходных металлов (для которых мультikonфигурационный характер не является редкостью) и включают процессы адсорбции реагентов и десорбции продуктов.

Для исследования этого вопроса нами были рассмотрены комплексы ряда малых молекул с тетракарбоксилатом димеди, типовым строительным блоком многих металл-органических каркасов (в первую очередь широкоизвестного HKUST-1), которые активно исследуются на сегодняшний день для лабораторного и промышленного использования. Достаточно давно известно, что основным состоянием этого тетракарбоксилата является синглет, имеющий малый энергетический зазор от триплетного. В то время как триплет является одноконфигурационным состоянием и не представляет сложности для большинства методов, корректное описание синглета требует использования хотя бы минимального (2;2) активного пространства. Наличие триплетного состояния позволяет параллельно к основному исследованию рассмотреть применимость одноконфигурационных аналогов многоконфигурационных методов. Нами были проведены расчеты в 4 разных DFT-функционалах, синглетное состояние было рассмотрено в CASSCF, DAC-CAS(2) и NEVPT2 методах, в то время как триплетное – с использованием MP2, SOS-MP2, OO-MP2, MP3 и DLPNO-CCSD(T). Кроме экспериментальных данных в роли эталона в ряде случаев был использован экстремально дорогой DLPNO-MR-CCSD (2;2).

[†]e-mail: dmitry.sharapa@kit.edu

Electronic structure of nickel complex of tetrakis(1,2,5-thiadiazole)porphyrzine

Жабанов Ю.А.^{†a}

^a Ивановский государственный химико-технологический университет, Шереметевский пр. 7, г. Иваново, Россия.

The electronic configuration of Ni(II) is $[\text{Ar}]3d^8$, therefore, it can form in ground state singlet, or triplet complexes. Furthermore, the computational investigations of Ni(II) complexes are often non-trivial due to the necessity to account for the multireference character of the wavefunction.

The electronic structure of complex tetrakis(1,2,5-thiadiazole)porphyrzine with nickel (**NiTTDPz**) have been studied by CASSCF method followed by accounting for dynamic electron correlation by multiconfigurational quasidgenerate second-order perturbation theory (MCQDPT2). According to data obtained by MCQDPT2 method **NiTTDPz** complex possess the ground states $^1A_{1g}$. The low-lying triplet state is higher by 88.4 kJ mol⁻¹ in energy than the corresponding ground state. It should be noted that, according to CASSCF calculations, **NiTTDPz** possesses a triplet ground state. Such contradictory conclusions about the multiplicity of the ground state obtained using the CASSCF and MCQDPT2 methods are apparently due to the fact that the CASSCF calculations with a small active space do practically not take into account the dynamic correlation of electrons. An analysis of the data listed shows that the wave functions of the ground states and the most low-lying triplet states have the form of a single determinant.

Acknowledgement. This work is supported by the Russian Science Foundation (grant № 19-73-00256).

[†]e-mail: zhabanov@gmail.com

Список слушателей

Участник	Аффилиация	E-mail
Ксения Брилинг	EPFL	kсения.briling@epfl.ch
Рифат Гиматдин	—	rifat.samat.u@gmail.com
Вениамин Григорьев	—	beng@ipac.ac.ru
Артем Кокорин	—	kokorinartem1994@gmail.com
Ольга Купова	УГНТУ	olgakupova@gmail.com
Александр Локтев	—	osmiy74@yandex.ru
Михаил Луканов	—	lukanov-9b@yandex.ru
Елизавета Петрусевиц	—	lizaveta.petrusevich@pwr.edu.pl
Игорь Сеньченко	Kharkov National University	igor_senchenko@ukr.net
Сергей Стёпин	Бакинский филиал МГУ имени М.В. Ломоносова	sergey.chemistry@gmail.com
Никита Сызранцев	Сеченовский Университет	nicksyz13@gmail.com
Алексей Трепетский	СПБЛТУ	Trepetsky@yandex.ru
Лариса Шамсутдинова	Казанский национальный исследовательский технологический университет	larisasham@mail.ru
Андрей Шернюков	—	shernyukov@gmail.com

Организаторы:

- Dr. Сергей Баронов, владелец и администратор ChemPort.Ru (информационная и техническая поддержка)
- Dr. Юрий Вишневецкий, Universität Bielefeld
- Dr. Евгений Панкратьев, Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, QChem.Ru
- Dr. Денис Тихонов, Deutsches Elektronen-Synchrotron, Свободный университет Москва
- Dr. Александра Фрейдзон, Центр фотохимии РАН, МИФИ
- Dr. Дмитрий Шарапа, Karlsruher Institut für Technologie
- Dr. Леонид Ширков, Institute of Physics, Polish Academy of Science