

**Аннотация научных трудов, выдвигаемых на соискание премии, присуждаемой  
Санкт-Петербургским государственным университетом за научные труды в 2021  
году**

**Полное название работы:**

Компьютерное моделирование и теоретические исследования в органической, неорганической и металлоорганической химии: нековалентные взаимодействия, реакционная способность и катализ

**Фамилия, имя, отчество, учёная степень и должность автора:**

Новиков Александр Сергеевич, кандидат химических наук, старший научный сотрудник Института химии СПбГУ

Компьютерное моделирование может помочь химикам-экспериментаторам при изучении структуры, свойств и реакционной способности широкого спектра органических, неорганических и металлоорганических соединений. На сегодняшний день в квантовой химии компьютерное моделирование практически полностью заменило традиционные аналитические математические методы расчета. Компьютерное моделирование позволяет в некоторых случаях предсказать ранее ненаблюдаемые химические явления, оно фактически представляет собой новый способ проведения научных исследований в химии – компьютерный эксперимент.

Научные труды в области компьютерного моделирования, выдвигаемые на соискание данной премии, посвящены применению современных методов квантовой и вычислительной химии (*ab initio* и теории функционала плотности), а также некоторых специальных методик (например, топологического анализа распределения электронной плотности, анализа натуральных связевых орбиталей, анализа зарядового разложения, коррекции суперпозиционной ошибки базисного набора, метода изодесмических реакций, теории жёстких и мягких кислот и оснований, анализа поверхностей Хиршфельда) для проведения исследований по следующим направлениям: свойства металлоорганических и координационных соединений, их реакционная способность, катализ.

Основное внимание в цикле работ уделено:

- Исследованию природы и энергетических характеристик различных типов нековалентных взаимодействий (водородных, галогенных и халькогенных связей, стекинга, металлофильных взаимодействий и др.) – парадигмы супрамолекулярной химии и кристаллохимического дизайна.
- Изучению реакций нуклеофильного и циклоприсоединения (их механизмов, движущих сил, кинетики и термодинамики), а также другим фундаментальным вопросам теоретической химии (конформационным переходам и барьерам вращения функциональных групп, природе химических связей, орбитальным и зарядовым факторам, фотофизическим свойствам различных соединений).
- Рассмотрению перспективных для нефтегазовой промышленности процессов окисления углеводородов и их конверсии в спирты и эпоксиды.

Результаты, полученные в ходе исследований в рамках данного цикла работ, важны для биохимии (понимание природы фолдинга белков), медицины (синтез антибактериальных, противовирусных и противоопухолевых препаратов, меток для нейтрон-захватной терапии онкологических заболеваний), химической промышленности и технологии (катализ процессов кросс-сочетания, мультикомпонентных реакций и конверсии углеводородов), материаловедения (создание наукоёмких материалов, обладающих ценными окислительно-восстановительными, электронными, механическими, магнитными и оптическими свойствами, перспективными для изготовления светодиодов, фотоэлементов солнечных электростанций, пористых структур с развитой поверхностью, сенсоров, аккумуляторных элементов, жидких кристаллов).

Исследования носят междисциплинарный характер и выполнены на стыке теоретической и экспериментальной химии, кристаллографии и материаловедения.