

## PL-18

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ НУЖД МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ, КАТАЛИЗА И МЕДИЦИНЫ****А. С. Новиков**<sup>1, 2, 3</sup>

<sup>1</sup>Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7/9;

<sup>2</sup>Научно-образовательный центр инфохимии, Университет ИТМО, 197101, Россия, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, 49;

<sup>3</sup>Объединённый институт химических исследований, Российский университет дружбы народов, 117198, г. Москва, улица Миклухо-Маклая, 6.

E-mails: a.s.novikov@spbu.ru или novikov@itmo.ru

Компьютерное моделирование химических систем – одно из наиболее динамично развивающихся направлений современного материаловедения и смежных естественно-научных дисциплин. Такого рода исследования служат отправной точкой для создания наукоёмких материалов, применимых в катализе и медицине.

Настоящий доклад посвящён презентации и краткому обсуждению результатов моих научных исследований за последние 10 лет в области теоретического изучения различных нековалентных взаимодействий в органических/неорганических/металлоорганических химических соединениях и их реакционной способности. Цикл данных работ изложен в более чем 265 статьях в высокорейтинговых профильных международных научных журналах, включая Nat. Commun., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., Chem. Commun., Chem. Eur. J., Chem. Asian J., ACS Catal, RSC Catal. Sci. Tech., Cryst. Growth Des., CrystEngComm, Inorg. Chem., J. Org. Chem., Organometallics, Org. Biomol. Chem., Phys. Chem. Chem. Phys., Dalton Trans., J. Phys. Chem. Lett. и др. – см. Scopus ID: 50262902200 и/или [https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=n\\_rVOQcAAAAJ](https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=n_rVOQcAAAAJ).

Формально можно выделить три основных направления моих научных исследований, обсуждаемых в настоящем докладе: реакции циклоприсоединения и нуклеофильного присоединения (их механизмы, движущие силы, кинетика и термодинамика); катализ различных процессов окисления углеводородов; природа и прочность различных нековалентных взаимодействий в супрамолекулярных химических системах.

Результаты, полученные в ходе моих исследований, способствуют пониманию природы соединений, имеющих широкий спектр применения в биологии и медицине (в частности, в нейтрон-захватной терапии онкологических заболеваний), являющихся перспективными катализаторами важнейших органических реакций кросс-сочетания (в частности, реакций Сузуки, Хека и Соногаширы), а также обладающих ценными окислительно-восстановительными, магнитными и оптическими свойствами, перспективными для изготовления светодиодов и фотоэлементов солнечных электростанций.

*Часть исследований, обсуждаемых в рамках данного доклада, выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства РУДН.*