

Институт нефтехимии и катализа Уфимского федерального
исследовательского центра РАН
Уфимский университет науки и технологий
Академия наук Республики Башкортостан
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева

ПРОГРАММА
Российской научной конференции с
международным участием
«Математические методы в химии и
химической технологии»,
посвященная памяти
Семена Израилевича Спивака

02-03 февраля 2023 г., г. Уфа

Программный комитет:

Председатель:

Сабилов Денис Шамилович, д.х.н., директор ИНК УФИЦ РАН

Члены программного комитета:

Юнусов М.С., д.х.н., академик РАН, Уфимский институт химии УФИЦ РАН, г.Уфа

Тишкин В.Ф., д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН, Институт прикладной математики им.

М.В. Келдыша РАН

Варфоломеев С.Д., д.х.н., член-корреспондент РАН, Институт биохимической физики им.

Н.М. Эмануэля РАН

Prof. Gregory Yablonsky, Washington University in St Louis, ST Louis, Missouri, USA

Dr. Ottorino Ori, Actinium Chemical Research Institute, Rome, Italy

Морозкин Н.Д., д.ф.-м.н., Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа

Хурсан С.Л., д.х.н., Уфимский институт химии УФИЦ РАН, г.Уфа

Мустафина С.А., д.ф.-м.н., Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа

Губайдуллин И.М., д.ф.-м.н., Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Талипов Р.Ф., д.х.н., Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа

Вакулин И.В., д.х.н., Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа

Организационный комитет

Председатель:

Сабилов Денис Шамилович – д.х.н., директор ИНК УФИЦ РАН

Заместитель председателя:

Мустафина Светлана Анатольевна – д.ф.-м.н., профессор Уфимского университета науки и технологий

Ответственный секретарь:

Коледина Камила Феликсовна – д.ф.-м.н., Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Члены оргкомитета:

Галимов Д.И. – к.ф.-м.н., Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Губайдуллин И.М. – д.ф.-м.н. Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Лукманов Т.И. – Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Спивак А.Ю., к.х.н., Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Тухбатуллин А.А. – к.ф.-м.н., Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

Шепелевич И.С. – к.х.н., Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа

02 февраля 2023 г.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа, проспект Октября, 141.

- 11:00-11:20 ОТКРЫТИЕ КОНФЕРЕНЦИИ (актовый зал ИНК УФИЦ РАН)
ДОКЛАДЫ (актовый зал ИНК УФИЦ РАН)
Председатель: д.х.н. Сабиров Д.Ш.
- 11:20-11:40 История развития математического моделирования в Институте нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (НИИНефтехим)
Губайдуллин Ирек Марсович (ИНК УФИЦ РАН)
- 11:40-12:00 Дефрагментация молекулярных структур и ее использование при исследовании молекулярной энергетики органических соединений
Хурсан Сергей Леонидович (УФИХ УФИЦ РАН)
- 12:00-12:20 Информационная энтропия молекулярного ансамбля: неаддитивность и применение к анализу химических реакций
Сабиров Денис Шамилевич (ИНК УФИЦ РАН)
- 12:20-12:40 Автоматический поиск и разработка схем синтеза молекул-мишеней М.М. Канчурина Миннигуль Махамадьяновна, Вакулин Иван Валентинович, Талипов Рифкат Фаатович (УУНиТ)
- 12:40-13:00 Современная химическая кинетика. Механизмы сложных биохимических процессов [онлайн]
Варфоломеев Сергей Дмитриевич (МГУ им. М.В. Ломоносова, Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН)
- 13:00-14:00 ПЕРЕРЫВ НА ОБЕД
- 14:00-14:20 Высокоточные бикомпактные схемы [онлайн]
Тишкин Владимир Федорович, Брагин Михаил Дмитриевич (Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН)
- 14:20-14:40 Size-related graph transitivity for Klein bottle fullerenes [онлайн]
Dr. Ottorino Ori (Actinium Chemical Research Institute, Rome, Italy)
- 14:40-15:00 Сайт связывания ингибиторов S-белка патогенного коронавируса SARS-CoV-2
Борисевич София Станиславовна (УФИХ УФИЦ РАН)
- 15:00-15:20 Моделирование кинетики гетерогенной реакции синтеза метил трет-бутилового эфира с учетом процесса диффузии
Усманова Арина Александровна, Коледина Камила Феликсовна (УГНТУ, ИНК УФИЦ РАН)
- 15:20-15:40 Математическое моделирование процесса окисления изопропилбензола и исследование по оптимизации процесса
Вовденко Михаил Константинович, Коледина Камила Феликсовна, Губайдуллин Ирек Марсович (ИНК УФИЦ РАН)
- 15:40-16:00 Модель распределенной поляризуемости ковалентно связанных фуллереновых наноагрегатов
Тухбатуллина Алина Асхатовна, Сабиров Денис Шамилевич (ИНК УФИЦ РАН)

03 февраля 2023 г.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, г. Уфа, проспект Октября, 141.

ДОКЛАДЫ (актовый зал ИНК УФИЦ РАН)

Председатель: д.х.н. Сабиров Д.Ш.

- 14:00-14:20 Прямые и обратные задачи кинетики сложных химических реакций [онлайн]
Быков Валерий Иванович (Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН)
- 14:20-14:40 Детализированные кинетические модели каталитических реакций – основа интервальной многокритериальной оптимизации
Коледина Камила Феликсовна (ИНК УФИЦ РАН)
- 14:40-15:00 Оптимизация структуры новых сульфанилазолов путем виртуального скрининга в качестве селективных ингибиторов циклооксигеназы-2
Хайруллина Вероника Радиевна, Ахмадиев Наиль Салаватович, Ахметова Внира Рахимовна (УУНиТ, ИНК УФИЦ РАН)
- 15:00-15:20 Обусловленное обратное влияние неопределенности исходных данных в задачах химической кинетики
Кантор Ольга Геннадиевна, Юнусова Дарья Сергеевна (УГНТУ, УУНиТ)
- 15:20-15:40 О построении кривой молекулярно-массового распределения продукта полимеризации на основе моделирования методом Монте-Карло
Мустафина Светлана Анатольевна, Михайлова Татьяна Анатольевна (УУНиТ)
- 15:40-16:00 Обратные задачи для полицентровых механизмов безобрывной полимеризации диенов
Гиззатова Эльвира Раисовна (УУНиТ)
- 16:00-16:20 ЧАЙНАЯ ПАУЗА
- 16:20-16:40 Математическое моделирование процессов в холинергическом синапсе при передаче нервного импульса [онлайн]
Варфоломеев Сергей Дмитриевич, Быков Валерий Иванович, Цыбенкова Светлана Батожаргаловна (МГУ им. М.В. Ломоносова, Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН)
- 16:40-17:00 Механизм окисления СО на золотых катализаторах по данным квантово-химических расчётов [онлайн]
Голосная Мария Николаевна, Пичугина Дарья Александровна (МГУ им. М.В. Ломоносова)
- 17:00-17:20 Квантовохимическое моделирование окисления СО на сульфидном кластере меди, стабилизированном фосфиновыми лигандами [онлайн]
Бандурист Павел Сергеевич, Пичугина Дарья Александровна (МГУ им. М.В. Ломоносова)
- 17:20-17:40 Квантовохимическое изучение механизма гетерогенных каталитических реакций: проблема выбора модели [онлайн]
Пичугина Дарья Александровна, Елисеев Е. А. (МГУ им. М.В. Ломоносова)
- 17:40-18:00 Информативность эксперимента при решении обратных задач химической кинетики
Исмагилова Альбина Сабирьяновна (УУНиТ)
- 18:00-18:20 Семен Спивак, рыцарь обратной задачи [онлайн]
Prof. Gregory Yablonsky (Washington University in St. Louis, USA)
- 18:20 Заккрытие конференции

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ ВЫРАЖАЕТ БЛАГОДАРНОСТЬ ПАРТНЕРАМ КОНФЕРЕНЦИИ ЗА СОТРУДНИЧЕСТВО И СПОНСОРСКУЮ ПОДДЕРЖКУ!



РОНИ

ОБЩЕСТВО С ОГРАНИЧЕННОЙ ОТВЕТСТВЕННОСТЬЮ

химии. Дистрибьютор мирового лидера в области разработки технологических систем корейской компании SEIN TNS Co., Ltd.

ООО «Рони» - динамично развивающаяся компания в области поставок промышленного оборудования последнего поколения. Важнейшим направлением также являются поставки химического сырья и промышленной

химического сырья и промышленной



Liebherr, neoFroxx, Corning, Sartorius и др. «ХИММЕД» также активно сотрудничает со многими другими российскими и зарубежными партнерами в области поставок химических реактивов, фармацевтических субстанций, оборудования, расходных материалов.

Ключевое преимущество ХИММЕД состоит в оснащении лаборатории полностью, под ключ. Клиенты получают возможность заказать все необходимое для лаборатории в одном месте, и этим, безусловно, экономят время и собственные средства.

Компания «ХИММЕД» является официальным дистрибьютором крупнейших мировых производителей реактивов и оборудования для лабораторий: Merck, Sigma-Aldrich, Acros Organics, Scharlau, Thermo Fisher Scientific, Roth, IKA, Honeywell, Mettler Toledo, A&D, Bio-Techne (R&D, Tocris, Novus biologicals), Macherey-Nagel,



СПЕЦИАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

ФОТОНИКА

Компания «Специальные Системы. Фотоника» является поставщиком и интегратором лазерно-оптических и волоконно-оптических компонентов, лабораторного оборудования и лазерных систем различного назначения.

Миссия. Внедрение передовых лазерно-оптических технологий и продукции в производственные процессы, текущие и перспективные разработки российских научных и производственных центров. Активное участие в развитии фотоники в России, как наиболее перспективного направления науки и технологий.

Направления деятельности.

- Комплексное оснащение лабораторий и производств.
- Дизайн и изготовление лазерно-оптических изделий по ТЗ заказчика.
- Научно-технический центр радифотоники и интегральной оптики.
- Технический консалтинг и инженерный сервис.
- Проведение технических семинаров и конференций.