

Семенов Валентин Александрович, 4-й год обучения, специальность 02.00.03 – органическая химия, лаборатория структурной химии.

Кривдин Леонид Борисович, доктор химических наук, профессор, и.о. директора ИрИХ.

Список публикаций аспиранта:

1. Чернышев К.А., Семенов В.А., Кривдин Л.Б. Квантовохимические расчеты химических сдвигов ЯМР органических молекул. VIII. Эффекты сольватации в значениях химических сдвигов ^{15}N азотистых гетероциклов // Журн. орг. хим. – 2013. – Т. 49, Вып. 3. – С. 392-397.

2. Samultsev D.O., Semenov V.A., Krivdin L.B. On the accuracy of the GIAO-DFT calculation of ^{15}N NMR chemical shifts of the nitrogen-containing heterocycles – a gateway to better agreement with experiment at lower computational cost // Magn. Reson. Chem. – 2014. – V. 52, № 5. – P. 222-230.

3. Семенов В.А., Самульцев Д.О., Кривдин Л.Б. Квантовохимические расчеты химических сдвигов ЯМР органических молекул. XIII. К вопросу о точности расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N с учетом эффекта сольватации // Журн. орг. хим. – 2014. – Т. 50, Вып. 3. – С. 392-399.

4. Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. Solvent effects in the GIAO-DFT calculations of the ^{15}N NMR chemical shifts of azoles and azines // Magn. Reson. Chem. – 2014. – V. 52, № 11. – P. 686-693.

5. Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. Theoretical and experimental study of ^{15}N NMR protonation shifts // Magn. Reson. Chem. – 2015. – V. 53, № 6. – P. 433-441.

6. Semenov V.A., Samultsev D.O., Rulev A.Yu., Krivdin L.B. Theoretical and experimental ^{15}N NMR study of enamine–imine tautomerism of 4-trifluoromethyl- [b]benzo-1,4-diazepine system // Magn. Reson. Chem. – 2015.

Участие в конференциях:

1. Молодежная конференция «Современные технологии и научно-технический прогресс» (Ангарск, 2012, 2013, 2014, 2015)

2. Всероссийская научная конференция «Теоретическая и экспериментальная химия глазами молодежи», посвященная 80-летию Химического факультета ИГУ (Иркутск, 2013)

3. Конкурс проектов молодых ученых ИрИХ СО РАН в рамках научных Чтений памяти академика А.Е. Фаворского (Иркутск, 2014, 2015 (3 место));

Участие в проектах и грантах:

1. Грант РФФИ № 14-03-00218 «Стереoeлектронное строение целевых гетероатомных соединений на основе ацетилена по результатам спектроскопии ЯМР и квантово-химических расчетов высокого уровня».

2. Грант РНФ № 14-13-00215 «Релятивистские расчеты магнитно-резонансных параметров в структурных исследованиях новых практически важных органических и элементоорганических соединений».

Участие в конкурсах:

Конкурс проектов молодых ученых ИрИХ СО РАН в рамках научных Чтений памяти академика А.Е. Фаворского (Иркутск, 2014, 2015 (3 место)).