

ИНСТИТУТ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, Лаборатория РСИ №201

ПОРТФОЛИО АСПИРАНТА

МЕДВЕДЕВА МИХАИЛА ГЕННАДЬЕВИЧА

НАПРАВЛЕНИЕ: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ (ШИФР 04.06.01)

ПРОФИЛЬ: ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ШИФР 02.00.04)

E-MAIL: MEDVEDEV.M.G@GMAIL.COM

Тема диссертационного исследования

Тема исследования:

«Достоверность результатов
квантовохимических расчётов
методами теории функционала
плотности»



Научный
руководитель,
д.х.н., г.н.с.
Лысенко К. А.

Тема была утверждена ученым советом ИНЭОС РАН согласно
протоколу №2 от 22.02.2017

Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по синтетической химии, до прихода в АРСИ ИНЭОС РАН

1. I. Bräunlich, M. G. Medvedev, J. Dshemuchadse, M. Wörle, and W. Caseri, "Trinuclear Complexes of Nickel(II) and 4-Amino-1,2,4-triazole," *Z. anorg. allg. Chem.*, vol. 641, no. 12–13, pp. 2344–2349, Oct. 2015.
2. A. I. Illovaisky, M. G. Medvedev, V. M. Merkulova, M. N. Elinson, and G. I. Nikishin, "Green Approach to the Design of Functionalized Medicinally Privileged 4-Aryl-1,4-dihydropyrano[2,3-c]-pyrazole-5-carbonitrile Scaffold," *J. Heterocyclic Chem.*, vol. 51, no. 2, pp. 523–526, Mar. 2014.
3. M. N. Elinson, M. G. Medvedev, A. I. Illovaisky, V. M. Merkulova, T. A. Zaimovskaya, and G. I. Nikishin, "Solvent-free cascade assembling of salicylic aldehydes and malononitrile: rapid and efficient approach to 2-amino-4H-chromene scaffold," *Mendeleev Communications*, vol. 23, no. 2, pp. 94–95, Mar. 2013.

Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

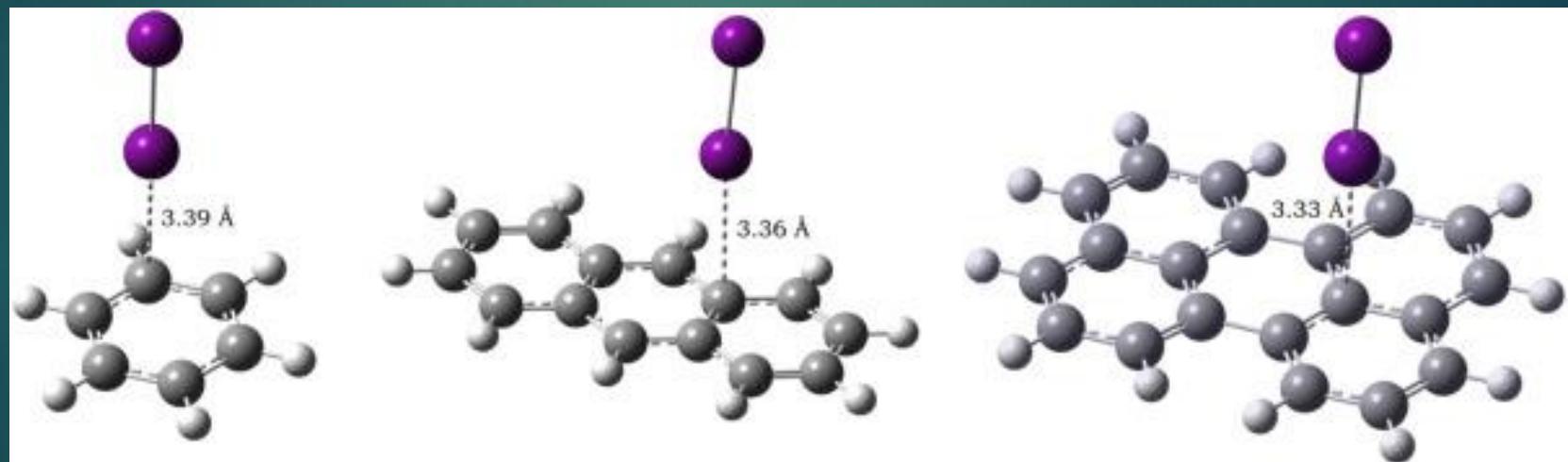
Публикации по решению монокристалльных РСА в АРСИ ИНЭОС РАН

1. N. Kuznetsov *et al.*, “Stereoselective Synthesis of Novel Adamantane Derivatives with High Potency Against Rimantadine-Resistant Influenza A Virus Strains,” *Org. Biomol. Chem.*, Mar. 2017.
2. R. F. Salikov, K. P. Trainov, A. A. Levina, I. K. Belousova, M. G. Medvedev, and Y. V. Tomilov, “Synthesis of Branched Tryptamines via the Domino Cloke–Stevens/Grandberg Rearrangement,” *J. Org. Chem.*, vol. 82, no. 1, pp. 790–795, Jan. 2017.
3. M. G. Medvedev, V. V. Izmer, D. S. Kononovich, D. V. Uborsky, and A. Z. Voskoboynikov, “5-Butyl-5-(2-methyl-1H-inden-1-yl)-5H-dibenzo[*b,d*]silole,” *IUCrData*, vol. 1, no. 7, p. x161151, Jul. 2016.
4. M. G. Medvedev *et al.*, “Crystal structures of di- μ -bromido-bis{dibromido[η^5 -2-(dimethylamino)indenyl]zirconium(IV)} and dibromidobis[η^5 -2-(dimethylamino)indenyl]zirconium(IV),” *Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications*, vol. 72, no. 11, pp. 1599–1602, Nov. 2016.
5. K. V. Tambov, A. V. Manaev, M. I. Bazyleva, M. G. Medvedev, I. E. Ushakov, and V. F. Traven’, “Structure and condensation reactions of acyl(hydroxy)pyrido[1,2-a]indole borodifluoride complexes,” *Russ Chem Bull*, vol. 64, no. 4, pp. 883–890, Dec. 2015.

Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [1]

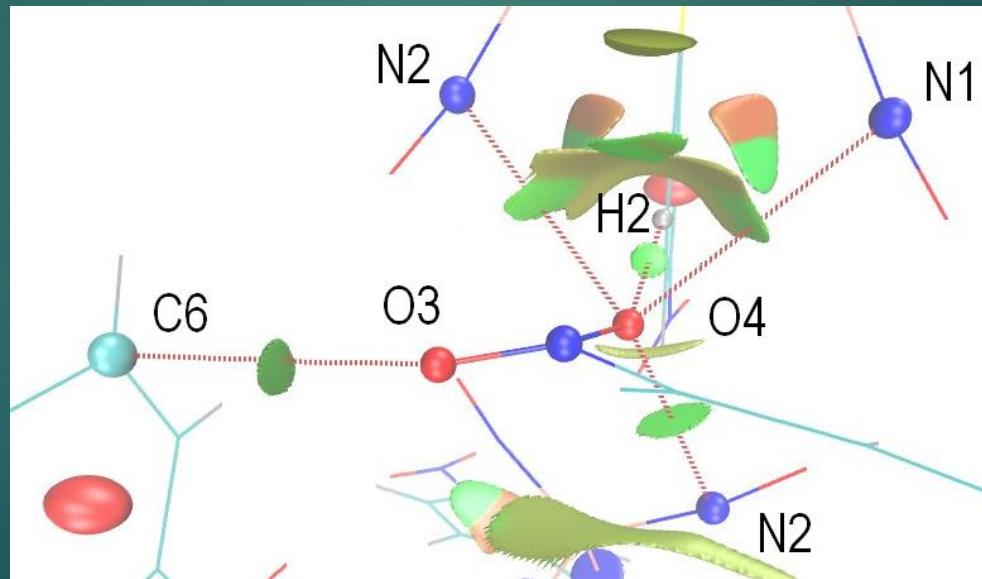
V. F. Traven *et al.*, “ π -Donors microstructuring on surface of polymer film by their noncovalent interactions with iodine,” *Materials Chemistry and Physics*, vol. 160, pp. 161–167, Jun. 2015.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [2]

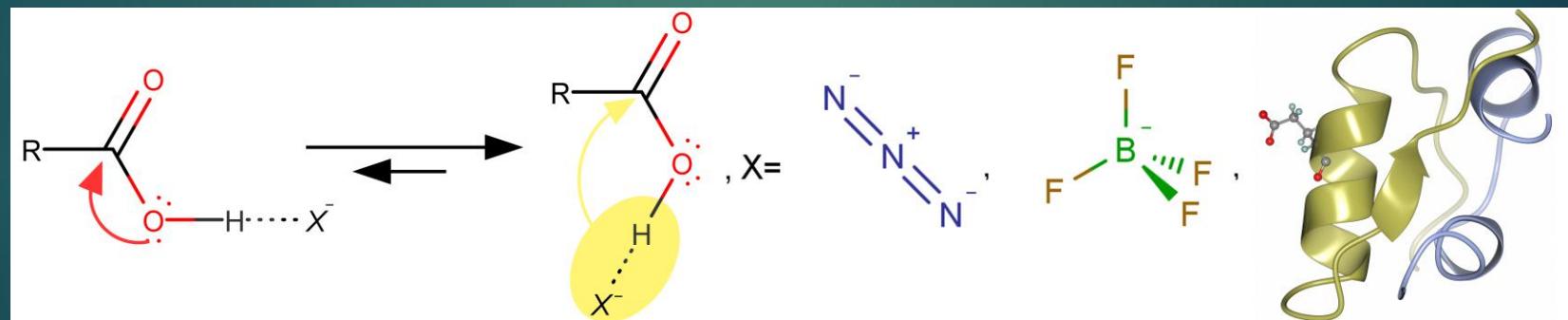
I. V. Ananyev, M. G. Medvedev, S. M. Aldoshin, I. L. Eremenko, and K. A. Lyssenko,
“Vibrational smearing of the electron density as function of the strength and
directionality of interatomic interactions: nonvalent interactions of a nitro group
within an island-type crystal $[\text{Fe}(\text{NO})_2(\text{SC}_6\text{H}_4\text{NO}_2)]_2$,” *Russ Chem Bull*, vol. 65, no. 6,
pp. 1473–1487, Jun. 2016.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [3]

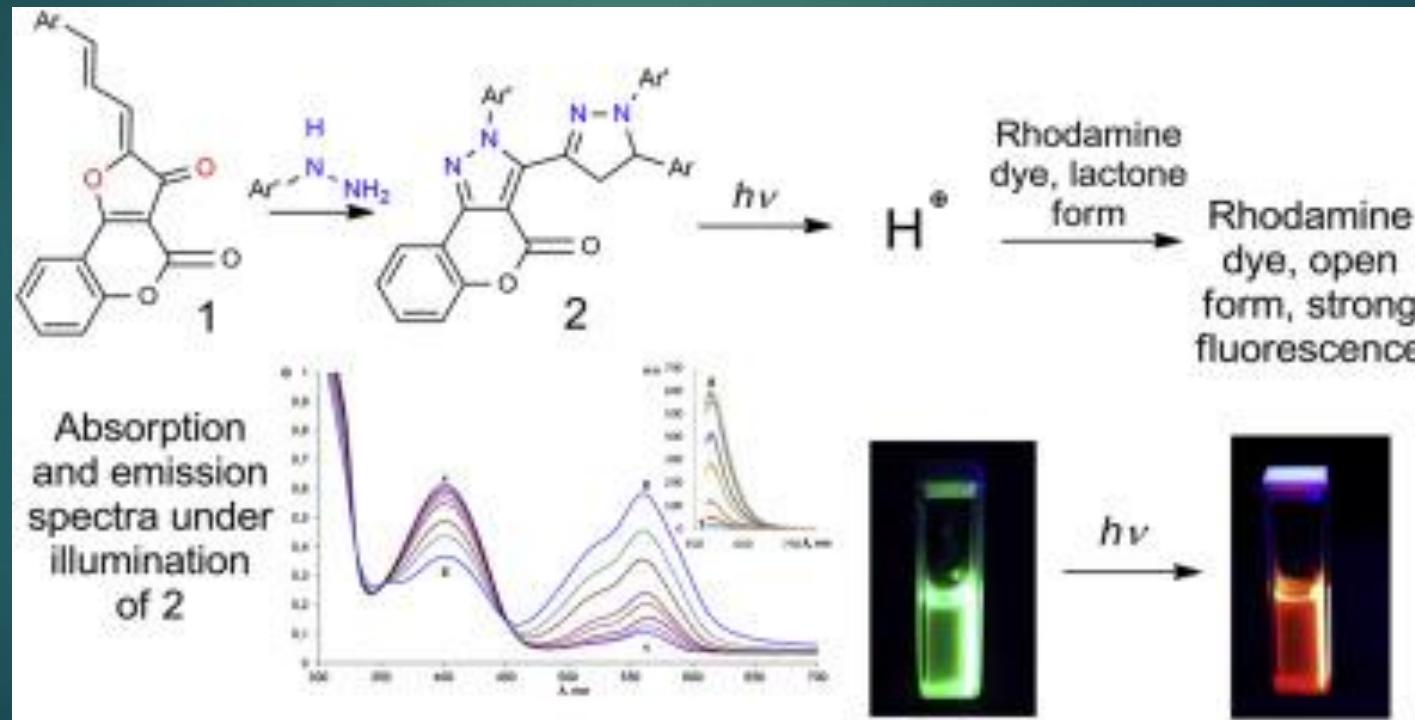
M. G. Medvedev, I. S. Bushmarinov, and K. A. Lyssenko, "Z-effect reversal in carboxylic acid associates," *Chem. Commun.*, vol. 52, no. 39, pp. 6593–6596, May 2016.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [4]

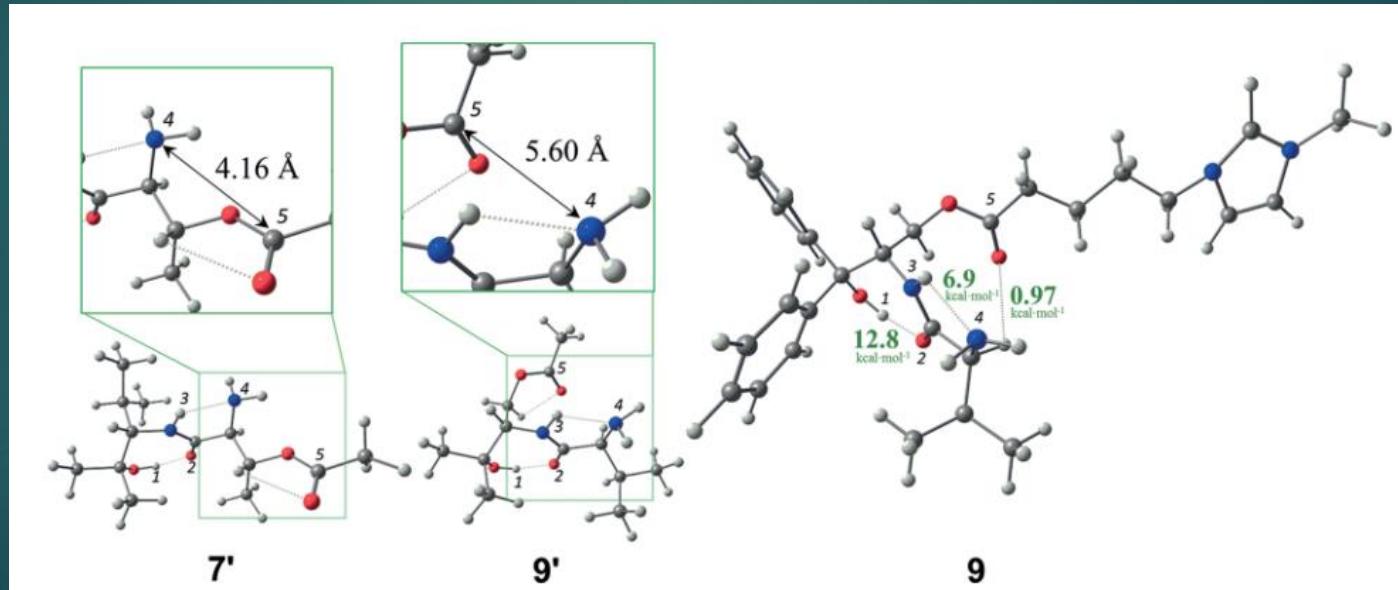
V. F. Traven *et al.*, “One-pot synthesis of new acid photogenerators for Rhodamine laser dyes fluorescence activation,” *Dyes and Pigments*, vol. 136, pp. 612–618, Jan. 2017.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [5]

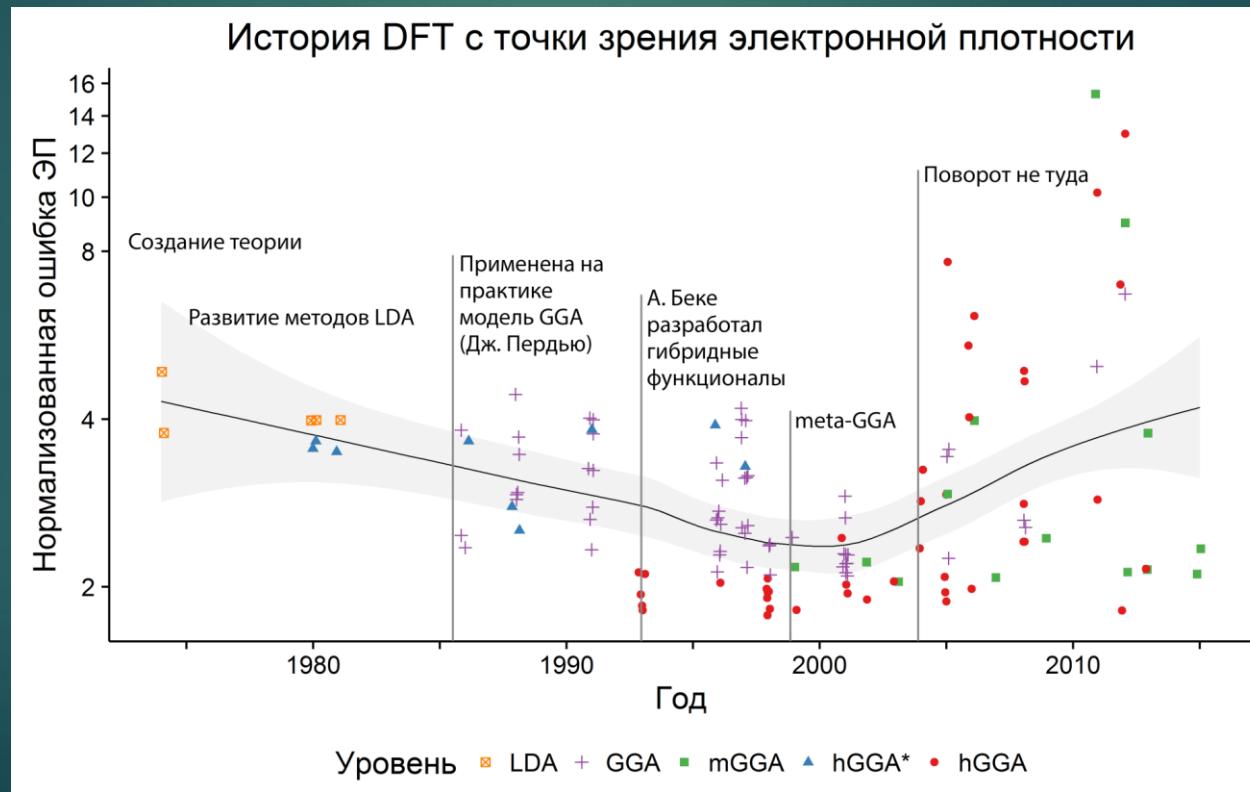
V. V. Gerasimchuk, A. S. Kucherenko, A. N. Fakhrutdinov, M. G. Medvedev, Y. V. Nelyubina, and S. G. Zlotin, "Towards sustainable amino acid-derived organocatalysts for asymmetric syn-aldol reactions," *Eur. J. Org. Chem.*, Jan. 2017.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [6]

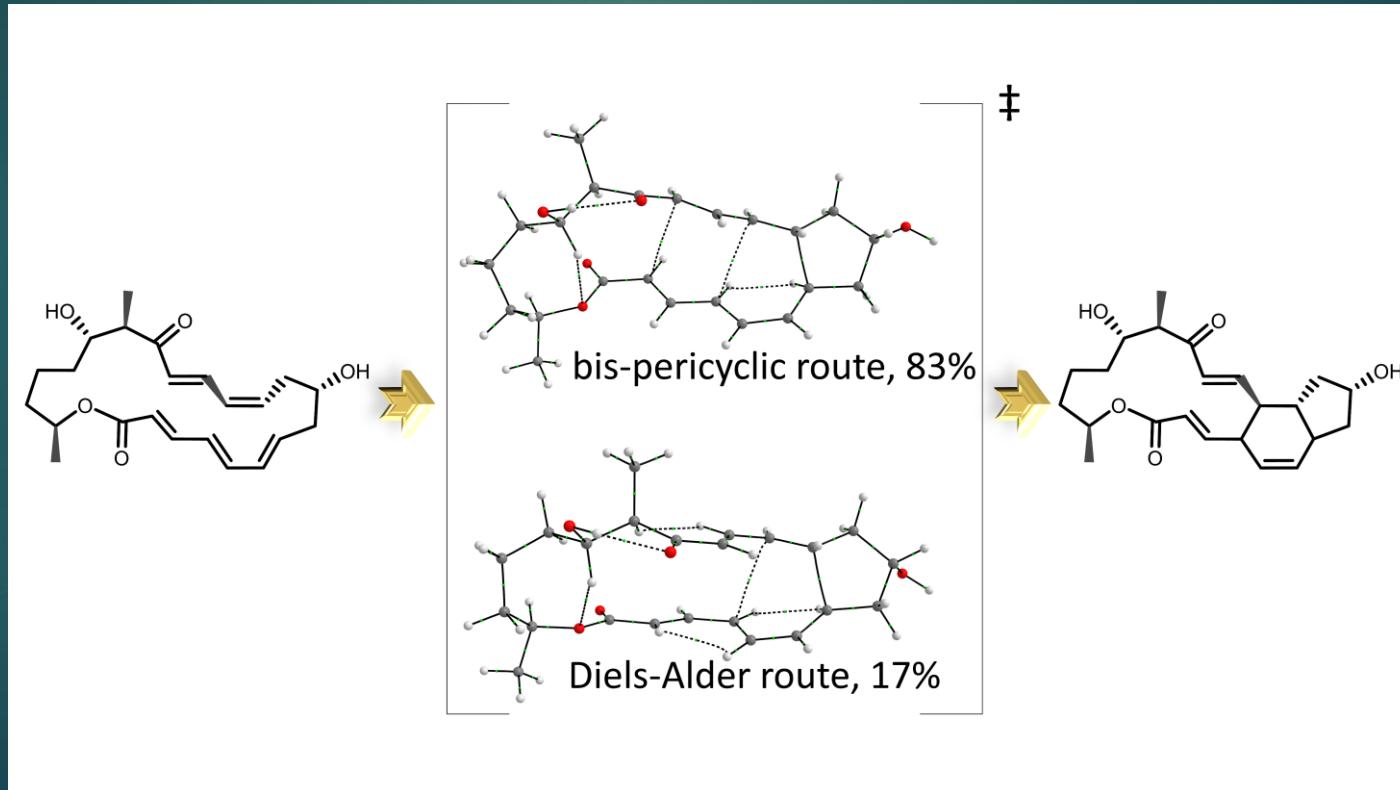
M. G. Medvedev, I. S. Bushmarinov, J. Sun, J. P. Perdew, and K. A. Lyssenko,
“Density functional theory is straying from the path toward the exact functional,”
Science, vol. 355, no. 6320, pp. 49–52, Jan. 2017.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [7]

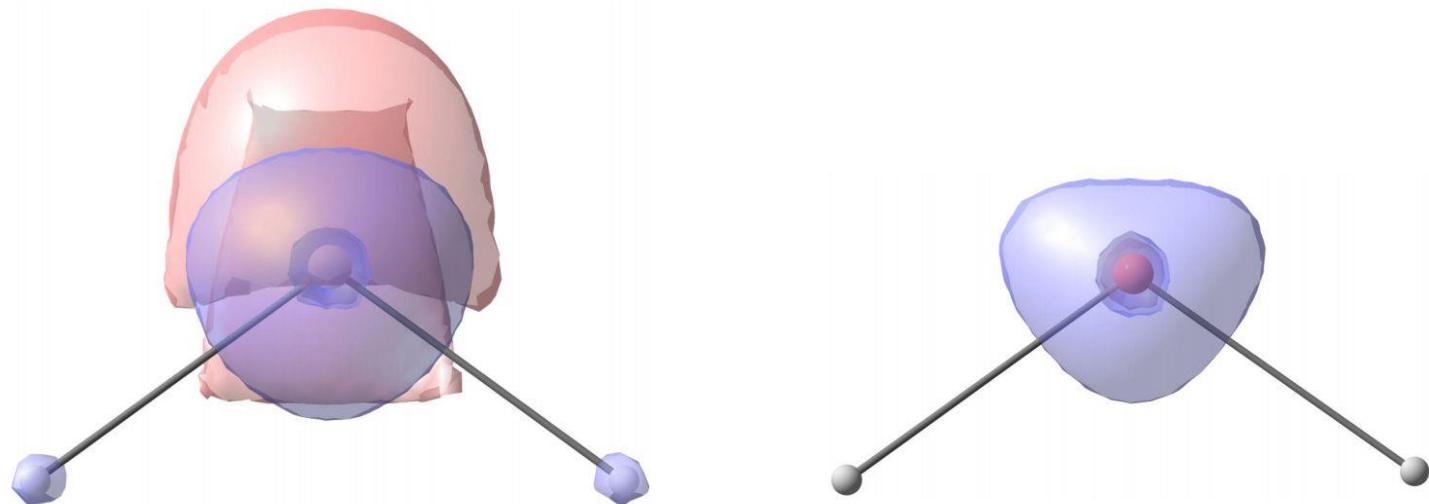
M. G. Medvedev et al., “Quantifying Possible Routes for SpnF-Catalyzed Formal Diels–Alder Cycloaddition,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 139, no. 11, pp. 3942–3945, Mar. 2017.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [8]

M. G. Medvedev, I. S. Bushmarinov, J. Sun, J. P. Perdew, and K. A. Lyssenko,
“Response to Comment on ‘Density functional theory is straying from the path
toward the exact functional,’” *Science*, vol. 356, no. 6337, pp. 496–496, May 2017.



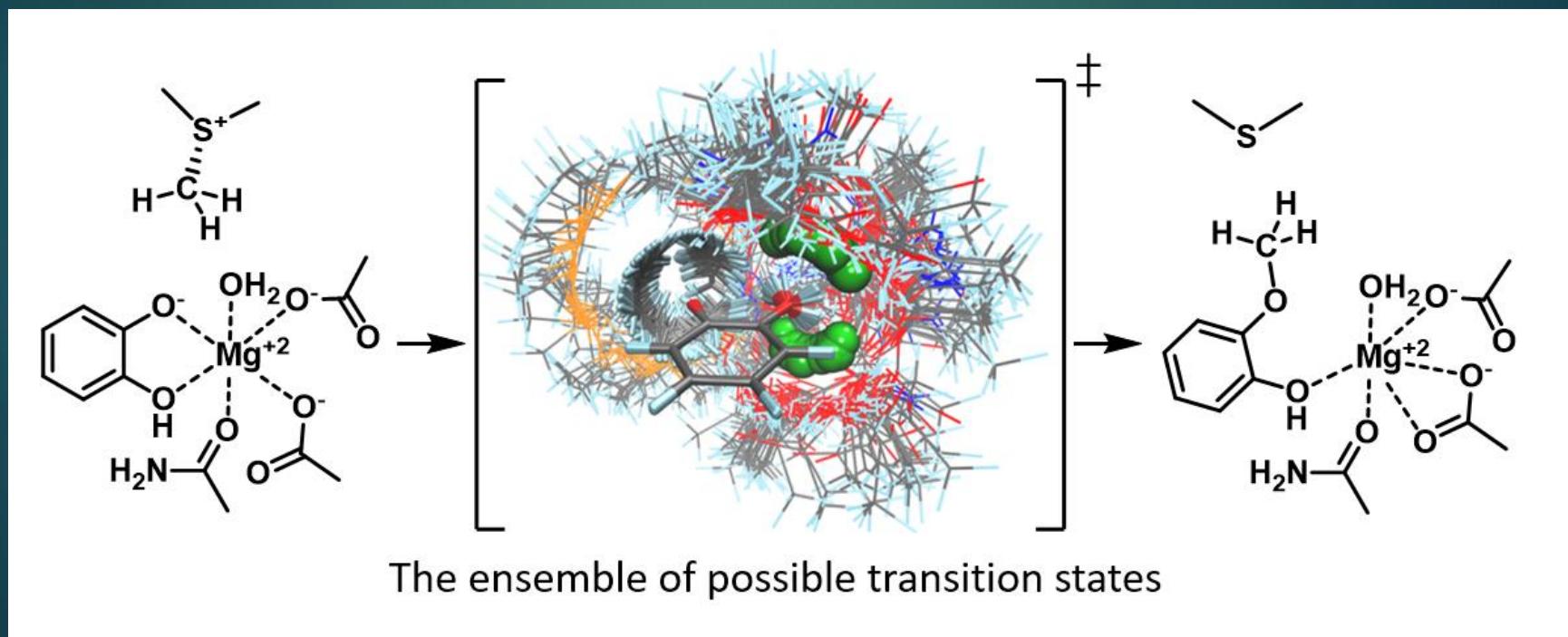
M11

PBE0

Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [9]

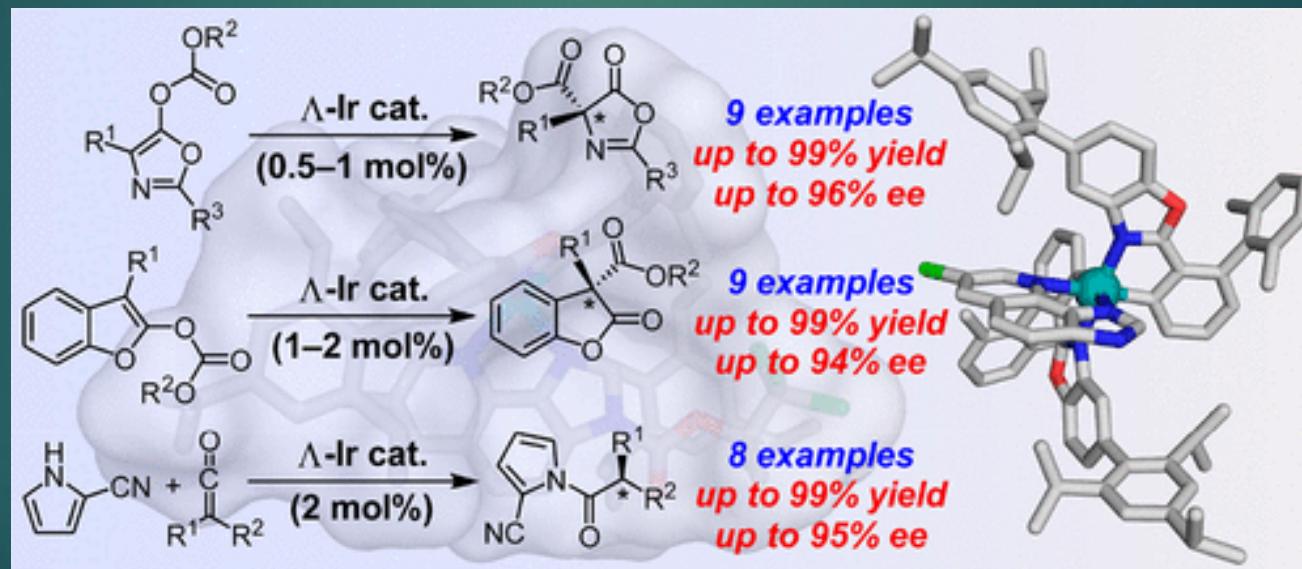
M. G. Medvedev et al., "Exhaustive conformational search for transition states: the case of catechol O-methyltransferase active site," *Mend. Comm.*, vol. 27, pp. 224–227, 2017.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [10]

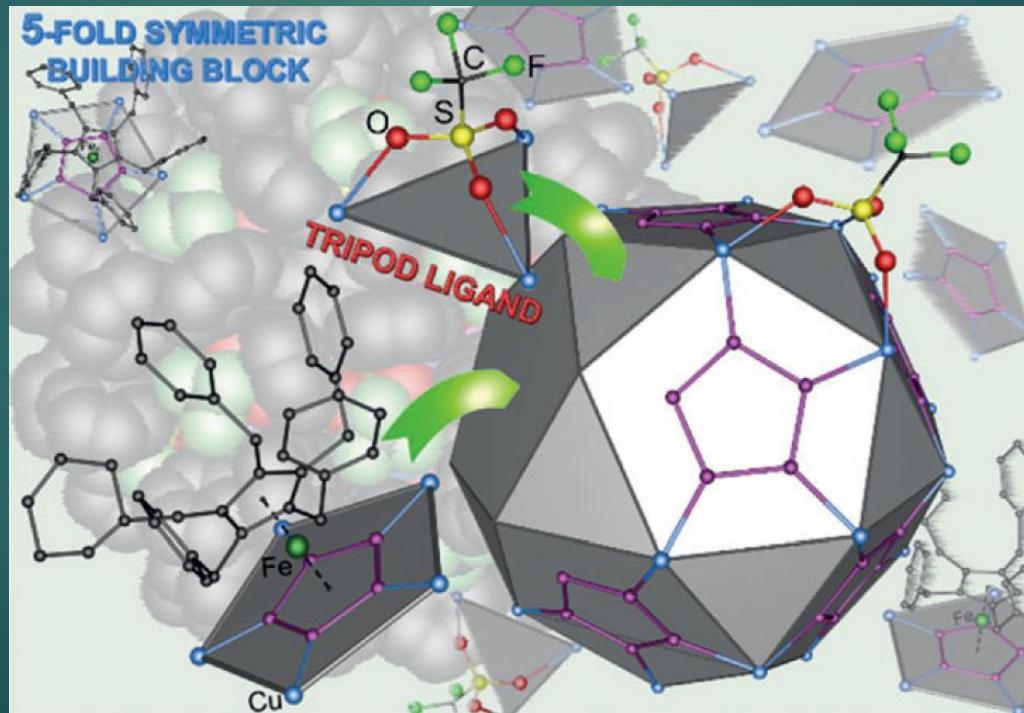
T. Cruchter, M. G. Medvedev, X. Shen, T. Mietke, K. Harms, M. Marsch, and E. Meggers, "Asymmetric Nucleophilic Catalysis with an Octahedral Chiral-at-Metal Iridium(III) Complex," *ACS Catal.*, no. 7, pp. 5151–5162, Jun. 2017.



Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по теме диссертационной работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН [11]

C. Heindl, E. Peresypkina, B. Krämer, A. Virovets, B. Dittrich, M. G. Medvedev, and I. S. Bushmarinov, M. Scheer, "An Icosidodecahedral Supramolecule Based on Pentaphosphphaferrocene: From a Disordered Average Structure to Individual Isomers," *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2017, DOI: 10.1002/anie.201706756.



Участие в научных конференциях

1. M. G. Medvedev, I. S. Bushmarinov, J. Sun, J. P. Perdew, and K. A. Lyssenko, "Accuracy of DFT self-consistent electron densities", *17th International Conference on Density-Functional Theory and its Applications*, Tällberg (Dalarna) Sweden, August 21st – 25th 2017
2. M. G. Medvedev, I. S. Bushmarinov, J. Sun, J. P. Perdew, and K. A. Lyssenko, "Density functional theory is straying from the path toward the exact functional", Virtual Winterschool on Computational Chemistry, URL: winterschool.cc, January 23rd – 27th 2017
3. М. Г. Медведев, "Достоверность результатов расчётов методами теории функционала плотности", WSOC. Марковниковские Чтения. Органическая Химия: от Марковникова до Наших Дней, Красновидово, Россия, 13 – 18 января 2017

Награды, полученные за время обучения в аспирантуре

1. Диплом победителя за электронный постерный доклад на “Virtual Winterschool on Computational Chemistry”, URL: winterschool.cc, January 23rd – 27th 2017
2. Второй диплом за устный доклад на “WSOC. Марковниковские Чтения. Органическая Химия: от Марковникова до Наших Дней”, Красновидово, Россия, 13 – 18 января 2017

Результаты промежуточной аттестации аспирантов

Экзамен	Оценка
История и философия науки	Отлично
Иностранный язык (английский)	Отлично
Специальность	
Масс-спектрометрия	Отлично
Элементный анализ	Отлично
Спектральные методы исследования вещества	Отлично
ЯМР спектроскопия	Хорошо
Хроматография	
Рентгеноструктурный анализ	

Педагогическая практика

1. Участие в комиссии по оценке работ студентов на конференции «НУ!-2017»;
2. Руководство лицеистом (ныне студентом) Герасимовым Игорем Сергеевичем. Результаты проведенных им исследований в настоящий момент готовятся к публикации;
3. Чтение курса «Молекулярное моделирование химических реакций» для четвертого курса ВХК РАН и третьего курса химического факультета МГУ им. Ломоносова (группа 309) в 2017-2018 учебном году.