



## ПОДСЕКЦИЯ

# “Физическая химия I: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия”

## СПИСОК СТЕНДОВЫХ ДОКЛАДОВ

Регламент: стендовая сессия проходит в дистанционном формате на сайте секции  
<https://lomonosov2021.chem.msu.ru/poster-session>

### СТУДЕНТЫ

#### Сравнительный анализ ансерина и баленина

Балашов Егор Васильевич (студент, 3 курс бакалавриата)  
*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

#### Теоретическое изучение клозо-боратных анионов вида $[B_nH_n]^{2-}$ ( $n = 5 - 12$ )

Власова Юлия Сергеевна (студент, 3 курс специалитета)  
*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
химический факультет, Москва, Россия*

#### Первичное эхо в гибких полимерах с изолированными трехспиновыми группами

Голубева Ирина Юрьевна (студент, 1 курс магистратуры)  
*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия*

#### Моделирование влияния π-стэкинг взаимодействий на энергию вертикальных переходов в органических хромофорах GFP-подобных белков в газовой фазе и белках

Захарова Татьяна Максимовна (студент, 5 курс специалитета)  
*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия*

#### Спектрально-люминесцентные свойства и агрегационное поведение диаминостирилзамещенного BODIPY красителя в растворах и тонких пленках

Калинкина Валерия Анатольевна (студент, 1 курс бакалавриата)  
*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия*

#### Локальная атомная и электронная структура кобальтсодержащего полиакрилонитрила, полученного в процессе ИК отжига

Косолапова Ксения Дмитриевна (студент, 4 курс бакалавриата)  
*Южный федеральный университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия*

#### Исследование кинетики образования вторичных гидратов в среде водонефтяных эмульсий

Крапивин Владимир Борисович (студент, 4 курс специалитета)





<i>Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова, институт естественных наук, Якутск, Россия</i>	
<b>Кристаллизация и структурные исследования новых сольватов Грамицидина С (Gramicidin S)</b>	Курилова Ксения Александровна (студент, 2 курс магистратуры) <i>Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия</i>
<b>Моно-, ди- и тримеры тиофена в «квантовой теории атомов в молекулах»</b>	Курочкин Георгий Александрович (студент, 1 курс магистратуры) <i>ФГБОУ ВО Тверской государственный университет, химико-технологический факультет, Тверь, Россия</i>
<b>Заряды и объемы групп изомеров декансульфона</b>	Нефедова Ирина Андреевна (студент, 3 курс специалитета) <i>Тверской государственный университет, химико-технологический факультет, Тверь, Россия</i>
<b>Моделирование фотофизических свойств флуоресцентных производных 2-пирона</b>	Синенко Григорий Дмитриевич (студент, 5 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
<b>Изучение молекулярной структуры бетулина и кристаллической структуры его сольватов расчетными методами</b>	Скакунова Ксения Денисовна (студент, 4 курс специалитета) <i>Новосибирский государственный университет, факультет естественных наук, Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия</i>
<b>Ранее неизвестные низкоэнергетичные пути распада 1,1-диамино-2,2-динитроэтилена</b>	Сыпко Тимофей Михайлович (студент, 4 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия</i>
<b>Моделирование методами молекулярной динамики процесса бактериального синтеза наночастиц сульфидов металлов</b>	Филин Павел Дмитриевич (студент, 5 курс специалитета) <i>Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина, Саратов, Россия</i>
<b>Моделирование реакционных систем в реальных условиях</b>	Хворост Тарас Андреевич (студент, 2 курс магистратуры) <i>Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Химико-биологический кластер, Санкт-Петербург, Россия</i>
<b>Компьютерное моделирование флуоресценции зеленого флуоресцентного белка вблизи анизотропных наночастиц серебра при одно- и двухфотонном возбуждении</b>	Шокова Мария Андреевна (студент, 2 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
<b>Спектральные и фотохимические свойства протонированной формы несимметричного бифотохромного соединения на основе стирилбензо[f]хинолина</b>	





<p><b>с оксиметиленовой мостиковой группой</b></p> <p>Дозморов Сергей Алексеевич (студент, 5 курс специалитета)  <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,          факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия</i></p>
<p><b>Моделирование формы полос в спектрах поглощения флуоресцентного красителя Fuga-2 в зависимости от окружения</b></p> <p>Волдаева Ольга Николаевна (студент, 1 курс магистратуры)  <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,          физический факультет, Москва, Россия</i></p>
<p><b>Особенности ионизации и фрагментации органических люминофоров</b></p> <p>Горелков Олег Павлович (студент, 3 курс бакалавриата)  <i>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,          Институт материалов современной энергетики и нанотехнологии, Москва, Россия</i></p>
<p><b>DFT-моделирование процесса S-тиолирования L-цистеина в присутствии серосодержащих ионов</b></p> <p>Долгов Георгий Дмитриевич (студент, 2 курс бакалавриата)  <i>Башкирский государственный университет, химический факультет, Уфа, Россия</i></p>
<p><b>Групповые заряды, энергии и объемы конформеров D- и L- цистеина</b></p> <p>Завилейская Виктория Алексеевна (студент, 1 курс магистратуры)  <i>Тверской государственный университет, Химико-технологический факультет, Тверь, Россия</i></p>
<p><b>Исследование влияния гидратации в квантово-химическом моделировании активного центра глутатионпероксидазы</b></p> <p>Карпов Валерий Владимирович (студент, 1 курс магистратуры)  <i>Санкт-Петербургский государственный университет, Институт Химии, Санкт-Петербург, Россия</i></p>
<p><b>Флуоресцентные красители на основе BODIPY для маркировки белков</b></p> <p>Кернер Анастасия Александровна (студент, 1 курс магистратуры)  <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i></p>
<p><b>Дипиррометеновые люминофоры как хемосенсоры для качественного и количественного определения ионов Zn<sup>2+</sup></b></p> <p>Красовская Зинаида Сергеевна (студент, 2 курс бакалавриата)  <i>Ивановский государственный химико-технологический университет,          факультет фундаментальной и прикладной химии, Иваново, Россия</i></p>
<p><b>Machine learning in application to deep eutectic solvent creation</b></p> <p>Лавриенко Анастасия Констанстиновна (студент, 1 курс магистратуры)  <i>ITMO University, Saint Petersburg, Russia</i></p>
<p><b>Теоретическое моделирование реакций гидрирования наноразмерных магниевых кластеров, допированных атомами переходных 3d-металлов</b></p> <p>Мальцев Алексей Павлович (студент, 6 курс специалитета)  <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,          факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия</i></p>
<p><b>QTAIM исследование глутамина и глутаминовой кислоты</b></p> <p>Матус Яна Александровна (студент, 4 курс специалитета)</p>





*ФГБОУ ВО Тверской государственный университет,  
химико-технологический факультет, Тверь, Россия*

**Квантово-химическое исследование смешаноэлементных гидридов  $\text{BSiPH}_6$  и  $\text{BSiPH}_6 \cdot \text{NMe}_3$**

Парфенюк Татьяна Николаевна (студент, 1 курс магистратуры)  
*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия*

**Состав масс-спектров электронного удара паров гемипорфиразина и дикарбагемипорфиразина**

Рыжов Игорь Витальевич (студент, 2 курс бакалавриата)  
*Ивановский государственный химико-технологический институт, Иваново, Россия*

**Оптические свойства раствора фуллерена  $\text{C}_{60}$  в триглицериде каприловой и каприновой кислот с добавлением полиэтиленгликоля**

Спиридонова Мария Константиновна (студент, 4 курс бакалавриата)  
*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), факультет химической и биотехнологии, Санкт-Петербург, Россия*

**Электронные параметры монозамещенных бензола**

Тимофеева Елизавета Владимировна (студент, 4 курс специалитета)  
*Тверской государственный университет, Химико-технологический факультет, Тверь, Россия*

## АСПИРАНТЫ

**Параметризация силового поля  $\text{Amber}$  для расчёта свойств комплексов хитозан-микроРНК**

Авдошин Александр Александрович (аспирант, 2 г.о.)  
*Нижегородский Государственный университет имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

**Влияние сверхкритических параметров состояния на пространственную структуру молекулы мефенамовой кислоты**

Белов Константин Васильевич (аспирант, 1 г.о.)  
*Институт химии растворов имени Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*

**Моделирование электрических свойств самоорганизованных пленок молекул  $\text{C}_{60}\text{F}_{18}$**

Горячевский Александр Владимирович (аспирант, 3 г.о.)  
*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

**Спектральные исследования  $\text{Sn(IV)}$ -протопорфирина(IX) в водных и мицеллярных растворах**

Кайгородова Елена Юрьевна (аспирант, 2 г.о.)  
*Институт химии растворов имени Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*

**Квантово-химическое моделирование димера фосфотидилхолина**

Курбатова Марина Сергеевна (аспирант, 4 г.о.)  
*Институт химии растворов им Г.А. Крестова, Российская академия наук, Иваново, Россия*

**Исследование комплексообразования и фотохимических свойств бетаиновых и аммониаalkильных стироловых красителей**







Лач Елизавета Андреевна (аспирант, 2 г.о.) <i>Московский физико-технический институт (НИУ), факультет молекулярной и химической физики, Москва, Россия</i>
<b>Молекулярно-динамическое моделирование смеси РС71ВМ / ODT</b> Малышев Максим Дмитриевич (аспирант, 3 г.о.) <i>Тверской государственный университет, Тверь, Россия</i>
<b>Интерпретация продуктов окисления L-цистеина</b> Низаметдинова Лиана Альбертовна (аспирант, 3 г.о.) <i>Башкирский государственный университет, химический факультет, Уфа, Россия</i>
<b>Влияние модификации структуры металл-органических каркасов на пути и скорость безызлучательной рекомбинации</b> Сызганцева Мария Алексеевна (аспирант, 3 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
<b>Квантово-химическое моделирование адсорбции СО и О<sub>2</sub> на тиолатных кластерах золота, допированных атомами меди и серебра</b> Бандурист Павел Сергеевич (аспирант, 1 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
<b>Изучение структуры молекулы 3,3,6-триметил-1,5-диазабицикло[3.1.0]гексана в газовой фазе</b> Агеев Георгий Геннадьевич (аспирант, 4 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
<b>Синтез и квантовохимическое моделирование структуры биядерных карбоксилатных комплексов переходных металлов</b> Гизатов Руслан Рустамович (аспирант, 4 г.о.) <i>Башкирский государственный университет, Химический факультет, Уфа, Россия</i>
<b>Борсодержащие соединения как ингибиторы металло-β-лактамазы NDM-1</b> Кривицкая Александра Вячеславовна (аспирант, 1 г.о.) <i>ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва, Россия</i>
<b>1-метокси-1,3,5-трисилациклогексан: квантово-химические расчеты и конформационный анализ</b> Кузьмина Любовь Евгеньевна (аспирант, 3 г.о.) <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, факультет неорганической химии и технологии, Иваново, Россия</i>
<b>Роль электронной обменной корреляции в водородных связях в молекулярных комплексах</b> Левина Елена Олеговна (аспирант, 3 г.о.) <i>Московский физико-технический институт, Москва, Россия</i>
<b>Исследование влияния заместителя на D-H...O взаимодействия в комплексах ароматических молекул с водой с помощью функции влияния электронной</b>





**ПЛОТНОСТИ**

Терехова Екатерина Олеговна (аспирант, 4 г.о.)  
*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,  
Институт Химии и проблем устойчивого развития, Москва, Россия*

**Мезоморфные свойства и особенности строения анизотропных производных  
тиадиазола**

Филиппов Иван Андреевич (аспирант, 1 г.о.)  
*Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*

**Изучение молекулярной структуры гидразидов пиридин-карбоновых кислот  
методами газовой электронографии и квантовой химии**

Чегодаев Николай Андреевич (аспирант, 1 г.о.)  
*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
химический факультет, Москва, Россия*