



## ПОДСЕКЦИЯ

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

#### ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

Регламент: устные доклады – до 8 мин, ответы на вопросы – до 7 мин

**13 апреля, вторник**

**Zoom:**

<https://us02web.zoom.us/j/88237889771?pwd=aWRDZVpqV21uN1JNTGgxRWVESGQ0dz09>

идентификатор 882 3788 9771, пароль 825957

**Председатель:** в.н.с., Ларин Александр Владимирович

**Секретарь:** н.с., Клещина Надежда Николаевна

15:00–15:05	Открытие подсекции “Физическая химия I” д.х.н., в.н.с. Ларин Александр Владимирович
15:05–15:20	Моделирование окисления метанола и этанола на оксиде ванадия: структурный эффект и эффект допирования Андреева Юлия Александровна (аспирант 1 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:20–15:35	Влияние анизотропии на свойства матрично-изолированного атома в Р состоянии Лейбин Иосиф Витальевич (аспирант 1 г.о.) <i>Сколковский институт Науки и Технологий, Москва, Россия</i>
15:35–15:50	Оценка значимости явного учёта индуктивного эффекта в эмпирических методах расчёта зарядов Шаймарданов Арслан Рамилевич (аспирант 4 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:50–16:05	Дизайн самособирающихся функционализирующих слоев поверхности платинового катализатора для стереоселективной адсорбции Лившиц Григорий Дмитриевич (студент, 4 курс бакалавриата) <i>Нижегородский государственный университет имени Н.И.Лобачевского, химический факультет, Нижний Новгород, Россия</i>





16:05–16:20	<p>Влияние химических модификаций на механизм и кинетику изомеризации хромофорной группы белков зрительной рецепции</p> <p>Кабылда Адиль Муратович (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:20–16:35	<p>Молекулярное моделирование образования наночастиц сульфида серебра в процессе бактериального синтеза</p> <p>Наумов Анатолий Анатольевич (аспирант 3 г.о.) <i>Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Кафедра «Информационная безопасность автоматизированных систем», Саратов, Россия</i></p>
16:35–16:50	<p>Развитие методов моделирования спектров нелинейного двухфотонного поглощения фотоактивных биомолекулярных систем</p> <p>Фархутдинова Дилара Айратовна (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:50–17:05	<p>Подбор оптимального метода для расчета электронной структуры и энергий ионизации <math>\beta</math>-дикетонов, их тио- и имино-аналогов</p> <p>Самойлов Илья Сергеевич (аспирант 2 г.о.) <i>Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, Санкт-Петербург, Россия</i></p>
17:05–17:35	<b>Перерыв</b>
17:35–17:50	<p>Взаимодействие супероксидного радикала со спиновой ловушкой тайрон: моделирование методом функционала плотности</p> <p>Любимовский Сергей Олегович (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
17:50–18:05	<p>Gas-phase mobility of the singly-charged actinide cation</p> <p>Visentin Giorgio (аспирант 3 г.о.) <i>Сколковский институт Науки и Технологий, Москва, Россия</i></p>
18:05–18:20	<p>Исследование влияния стэкинг взаимодействий на спектры поглощения хромофоров GFP-подобных белков в газовой фазе и белках</p> <p>Мулашкин Федор Дмитриевич (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>





18:20–18:35	<b>Симуляция спектров поглощения и флюоресценции производных азулена с учётом их колебательного разрешения</b> Козина Дарья Олеговна (студент, 1 курс магистратуры) <i>Санкт-Петербургский государственный университет, институт химии, Санкт-Петербург, Россия</i>
18:35–18:50	<b>Моделирование статистического процесса электронной эмиссии из основного состояния молекулярных анионов</b> Белецан Олег Богданович (студент, 3 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
18:50–19:05	<b>Термодинамика сорбции производных 1,2,4-триазола в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии</b> Гутров Виктор Николаевич (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
19:05–19:20	<b>Определение сайтов захвата водорода в матрицах инертных газов на основании моделирования спектров ЭПР при помощи <i>ab initio</i> расчетов и молекулярной динамики</b> Измоденов Даниил Витальевич (студент, 5 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
19:20–19:35	<b>Молекулярное моделирование доставки нуклеофила в активный центр пенициллинацилазы и реакционной способности комплекса ацилфермента с 6-аминопенициллановой кислотой</b> Архипова Татьяна Игоревна (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>

**21 апреля, среда**

**Zoom:**

<https://us02web.zoom.us/j/87558992273?pwd=NkR6OFdRNE83SGc5Q1FtLzAzQ1JDZz09>

**идентификатор 875 5899 2273, пароль 288297**

**Председатель:** в.н.с., Ларин Александр Владимирович

**Секретарь:** н.с., Клещина Надежда Николаевна

09:00–09:15

**Применение теории отклика для расчета одночастичных молекулярных свойств методом связанных кластеров**

Алексеев Иван Сергеевич (студент, 4 курс специалитета)  
*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*





09:15–09:30	<b>Конформационное равновесие 1-фенилпиперидин-4-она</b> Ерошин Алексей Валерьевич (студент, 2 курс магистратуры) <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i>
09:30–09:45	<b>Развитие методов расчета энергии вертикальной ионизации анионных хромофоров в водном окружении</b> Бойченко Антон Николаевич (аспирант 3 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
09:45–10:00	<b>Моделирование ионизованных и возбужденных состояний 4Me-BODIPY и его производных</b> Сидорин Андрей Евгеньевич (аспирант 3 г.о.) <i>Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия</i>
10:00–10:15	<b>Применение квантовых вычислений для расчета основного состояния молекулы CO</b> Мальков Максим Николаевич (аспирант 1 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
10:15–10:30	<b>Взаимосвязь внутреннего вращения с другими колебаниями в молекуле циклопропанкарбальдегида</b> Стёпин Сергей Сергеевич (студент, 2 курс магистратуры) <i>Бакинский филиал МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Баку, Азербайджан</i>
10:30–10:45	<b>Строение и электронные спектры некоторых метанофуллеренов</b> Грачева Софья Вадимовна (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
10:45–11:00	<b>Теоретическое описание сайтов захвата и спектров поглощения переходов <math>S \rightarrow P</math> атома иттербия в матрице неона</b> Каморзин Борис Борисович (аспирант 2 г.о.) <i>Сколковский институт Науки и Технологий, Москва, Россия</i>
11:00–11:30	<b>Перерыв</b>
11:30–11:45	<b>Прецизионные рентгенодифракционные исследования прочных водородных связей</b> Мацокин Никита Алексеевич (студент, 4 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





11:45–12:00	<p>Квантово-химическое моделирование производных фуранокумаринов и <math>SO_2</math>: теоретическая модель физического сорбционного эффекта</p> <p>Чепля Владислав Сергеевич (аспирант 1 г.о.) <i>Международный государственный экологический институт имени А.Д.Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь</i></p>
12:00–12:15	<p>Роль белкового окружения в динамике прямой и обратной реакции фотоизомеризации протонированного основания Шиффа в бактериальных и животных родопсинах</p> <p>Кусочек Павел Александрович (аспирант 4 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
12:15–12:30	<p>Моделирование эффектов электронного переноса в дефектных графенах</p> <p>Кисленко Виталий Александрович (аспирант 2 г.о.) <i>Сколковский институт Науки и Технологий, Москва, Россия</i></p>
12:30–12:45	<p>Эволюция полос оранжевой системы FeO в лазерной плазме при пониженном давлении</p> <p>Бегларян Бабкен Гагикович (студент, 3 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
12:45–13:00	<p>Исследование механизма реакции бензила и пропаргила</p> <p>Красноухов Владислав Сергеевич (аспирант, 3 г.о.) <i>Самарский университет, Самара, Россия</i></p>
13:00–13:15	<p>Квантово-химический расчет матричных элементов неадиабатического взаимодействия между низколежащими электронными состояниями радикала CN</p> <p>Терашкевич Вера Андреевна (аспирант 4 г.о.) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:15–13:30	<p>Подведение итогов. Награждение авторов лучших докладов. Закрытие подсекции.</p> <p>д.х.н., в.н.с. Ларин Александр Владимирович</p>

