

## Программа заседаний подсекции “Физическая химия – I”

**Регламент устных докладов** – до 10 минут, ответы на вопросы и обсуждение – до 5 минут.

Показ иллюстративного материала – мультимедийный проектор (презентации Power Point).

**Правила оформления стендов** – размер стенда А1, ориентация вертикальная.

<b>10 апреля, среда</b>	
<b>Вечернее заседание (15.00 – 17.45), Химический факультет, препараторская СХА.</b>	
<b>Председатели: к.ф.-м.н., в.н.с. Пупышев Владимир Иванович, д. х.н., проф. Столяров Андрей Владиславович</b>	
15.00-15.10	<b>Открытие подсекции “Физическая химия-I”</b> Вступительное слово: <b>д.х.н., в.н.с. Курамшина Гульнара Маратовна</b>
15.10-15.25	<b>Авдонин Иван Сергеевич</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Развитие метода моделирования спектра углового распределения фотоэлектронов
15.25-15.40	<b>Аствацатуров Дмитрий Александрович</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Структура парамагнитных центров в оксиде графита по данным спектроскопии ЭПР и квантово-химических расчетов
15.40-15.55	<b>Белов Константин Васильевич</b> <i>Ивановский государственный университет</i> Новый качественный способ экспресс оценки строения органических соединений класса алкалоидов на основе ЯМР спектроскопии и квантовохимических расчетов
15.55-16.10	<b>Бойченко Антон Николаевич</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Диполь-связанные и резонансные электронные состояния в фотоэлектронных спектрах молекулярных анионов
16.10-16.25	<b>Брехов Антон Тимофеевич</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Расчет электростатического потенциала полипептидов методом FMO и сравнение с методами на основе силовых полей
16.25-16.30	<b>Перерыв</b>
16.30-16.45	<b>Капуста Дмитрий Павлович</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Разработка и применение методов КМ/ММ
16.45-17.00	<b>Клиндухова Ирина Сергеевна</b> <i>Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева</i> Моделирование удерживания азотистых гетероциклов в условиях высокоэффективной жидкостной хроматографии
17.00-17.15	<b>Крапивин Владимир Борисович</b> <i>Факультет фундаментальной физико-химической инженерии МГУ</i> Квантово-химические расчеты окислительно-восстановительных потенциалов производных циклических нитроксильных радикалов в водном растворе
17.15-17.30	<b>Кулакова Анна Михайловна</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Молекулярное моделирование взаимодействия фермента KRAS <sup>G12C</sup> с соединением ARS-853
17.30-17.45	<b>Кусочек Павел Александрович</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Моделирование электронно-колебательных спектров хромофорных групп фотоактивных белков в белковом окружении
<b>11 апреля, четверг</b>	
<b>Стендовая сессия (9.00-12.30) Химический факультет, холл БХА, 2 этаж</b>	

11 апреля, четверг.

Вечернее заседание (15.00-17.45), Химический факультет, препараторская СХА.

Председатели: д.ф.-м.н., доц. Пазюк Елена Александровна,  
к.ф.-м.н., доц. Безруков Дмитрий Сергеевич

15.00-15.15	<b>Мельников Игорь Никитич</b> <i>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ</i> Кинетика и механизм первичных реакций разложения высокоэнергетических нитраминоов по данным высокоточных квантовохимических расчетов
15.15-15.30	<b>Метелешко Юлия Игоревна</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Молекулярное моделирование мутантных форм белка iLOV на основе производных флавина с модифицированными спектральными свойствами
15.30-15.45	<b>Олейниченко Александр Витальевич</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Метод связанных кластеров для прецизионного моделирования возбужденных состояний молекул димеров щелочных металлов
15.45-16.00	<b>Панкратова Янина Александровна</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Магнитные свойства псевдотетраэдрического комплекса кобальта (II) по данным парамагнитной спектроскопии ЯМР
16.00 -16.15	<b>Паньшина Светлана Юрьевна</b> <i>Национальный исследовательский Томский политехнический университет</i> Исследование строения N-ацетилпроизводных гликолурила методами ЯМР спектроскопии ( $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ ) с использованием расчетного моделирования
16.15-16.20	<b>Перерыв</b>
16.20-16.35	<b>Першин Андрей Александрович</b> <i>Самарский национальный исследовательский университет имени С.П.Королева</i> Столкновительные переходы в системе ArHe
16.35-16.50	<b>Петрусевич Елизавета Фёдоровна</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Молекулярный механизм окисления зеленого флуоресцентного белка
16.50-17.05	<b>Сидорин Андрей Евгеньевич</b> <i>Дальневосточный федеральный университет</i> Моделирование катионных и возбужденных состояний борфторидных комплексов дипирролилметена
17.05-17.20	<b>Бормотова Екатерина Александровна</b> <i>Химический факультет МГУ</i> Анализ спин-орбитальных взаимодействий в $A^1\Sigma^+-b^3\Pi$ и $D^1\Pi-d^3\Pi$ комплексов молекулы LiRb
17.20-17.45	<b>Подведение итогов подсекции “Физическая химия-I”</b>

Стендовые доклады		
1	Baibakova Viktoriia Vladimirovna	Topologically improved initial guess for the minimum energy path calculations in solid-solid phase transitions
2	Tolstov Georgy Igorevich	Температурные зависимости констант скоростей дезактивации O <sub>2</sub> (b) в интервале 300-800 К
3	Авдошин Александр Александрович	Определение термодинамических и кинетических характеристик координации олигомеров хитозана с инсулином методами молекулярной динамики
4	Агеев Георгий Геннадьевич	Изучение структуры молекул 1,2-дипропилдиазиридина и 1,2,3-триэтилдиазиридина
5	Алпысбаева Гульжазира Жанибековна	Проблемы применения ИК-спектроскопии для анализа структуры природных алюмосиликатов
6	Астахов Андрей Алексеевич	Тензор делокализации электронов, его собственные значения в молекулах и связь с тензором проводимости
7	Бабчук Илья Владимирович	Молекулярное моделирование амид-имидной таутомерии в растворе
8	Банару Александр Михайлович	Молекулярные координационные числа: новый взгляд на проблему
9	Биберина Евгения Сергеевна	ИК спектроскопическое изучение комплексов новых биологически активных экологически безопасных комплексонов, производных аминокислот с ионами некоторых 3d-металлов
10	Благов Максим Андреевич	Влияние ориентации этиленовых групп на спиновое состояние Fe(III) в спин-кроссовер комплексе [Fe(Sal <sup>2-</sup> -trien)] <sup>+</sup>
11	Богатов Никита Алексеевич	Исследование влияния инфразвуковых колебаний на электронный спектр поглощения йодиола
12	Богданов Артем Витальевич	Особенности термического поведения продуктов щелочного гидролиза нитрата лантана
13	Бодунов Артем Андреевич	Эффективный способ вычисления параметров спектров углового распределения фотоэлектронов
14	Бочаров Павел Сергеевич	Исследование супрамолекулярного комплексообразования алкилзамещенных BODIPY с сывороточными альбуминами
15	Васин Александр Александрович	Анализ продуктов фотоокисления меланолипофусциновых и липофусциновых гранул времяпролетной масс-спектрометрией вторичных ионов и спектрометрией флуоресценции
16	Веретенников Владимир Вячеславович	Молекулярная структура дикарбагемипорфиразинов никеля и цинка по данным dft-расчетов
17	Вознярский Андрей Юрьевич	Использование квантово-механических расчетов для оценки реакционной способности протонированной формы фосфонийодониевого иллада
18	Газимагомедов Магомед Алиевич	Hydricity and Acidity of the Fe and Ru PNP-, CNC-, NNN-Pincer Tetrahydrides
19	Герасимов Игорь Сергеевич	Влияние вибронного взаимодействия и функционалов TD-DFT на расчетные спектры поглощения арилгидразоноциклопентадиеновых красителей

20	Гиричева Марина Антоновна	Особенности геометрического и электронного строения органических производных сурьмы и висмута с салициловой и ацетилсалициловой кислотами
21	Говоров Дмитрий Николаевич	Thermodynamics of ionic liquids oligomers formation in the framework of DFT.
22	Домнин Антон Владимирович	Разработка программы для автоматического сканирования пространства химической реакции
23	Ефимов Николай Николаевич	ESEEM-спектроскопия комплексов РЗЭ с переносом заряда
24	Журавлёва Юлия Сергеевна	Влияние pH среды на механизмы фотоиндуцированных реакций между кинуреновой кислотой и аминокислотой триптофан
25	Захарова Татьяна Максимовна	Оценка константы диссоциации комплексов серии лигандов с белком KRASG12C методом жесткого докинга
26	Игнатъев Владислав Михайлович	Квантовохимическое моделирование гидратных комплексов сополимера N-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля
27	Измоденов Даниил Витальевич	Атом водорода в матрицах аргона, криптона и ксенона
28	Исаев Алексей Юрьевич	Диводородные связи в структуре N-тиофосфорилированных тиомочевин
29	Исламов Денис Насимович	Реакция каталитического циклоалюминирования $\alpha$ -олефинов: механизм и структура пятичленных алюминийорганических соединений
30	Кабылда Адиль Муратович	Моделирование механизма необратимой окислительно-восстановительной фотоконверсии двухцветного флуоресцентного белка
31	Кадиленко Евгений Михайлович	Квантовохимическое изучение магнитного мотива соли бис(бензол)хрома(II) с [1,2,5]тиадиазоло[3,4-c][1,2,5]тиадиазолидилом
32	Казимир Александр Романович	Исследование нековалентных взаимодействий в конформерах C5 и C7 диамида глютаминовой кислоты в контексте внутреннего давления электронного континуума
33	Красноухов Владислав Сергеевич	Исследование поверхности потенциальной энергии взаимодействия циклопентадиенил и инденил радикалов
34	Крылов Анатолий Анатольевич	Компьютерное моделирование структуры и кислотно-основных свойств полианилина в разных степенях окисленности
35	Кузьмина Любовь Евгеньевна	Конформационный анализ 1-фенил-1-RO-силациклогексанов (R=H, CH <sub>3</sub> )
36	Лач Елизавета Андреевна	Влияние микроокружения на фотохимическое поведение бетаиновых и амфифильных стироловых красителей
37	Лебедев Иван Сергеевич	Процессы самосборки в системах на основе замещенных ароматических карбоновых кислот
38	Левина Елена Олеговна	Гидратация карбоксильной группы диклофенака натрия

39	Лейбин Иосиф Витальевич	Доказательство существования нетривиального сайта захвата матрично-изолированного атома Ba
40	Литвиненко Михаил Александрович	Исследования подвижности ионов лития в структуре органического катодного материала поли (2,5-диазапарахинона) при помощи методов квантовой химии и молекулярной механики
41	Мальцев Алексей Павлович	Теоретическое моделирование реакций последовательного диссоциативного присоединения водорода к Ni-допированному магниевому кластеру $Mg_{17}Ni + nH_2$ ( $n=1-3$ )
42	Мерлян Антон Павлович	Внутримолекулярные водородные связи и ароматичность гемигексафиазина и триадиазол-аннелированного гемигексафиазина
43	Михина Полина Альбертовна	Сравнительное изучение фотохимических свойств фталоцианиновых аналогов
44	Мулашкин Фёдор Дмитриевич	Оценка свободной энергии связывания 3-меркаптопирувата в белке 3-меркаптопируватсульфотрансфераза методами молекулярного моделирования
45	Мялкина Анжела Вячеславовна	Применения термодинамического моделирования в технологии выплавки стали в дуговой сталеплавильной печи для получения с содержания углерода ниже 0,05%
46	Носенко Ксения Николаевна	Оценка устойчивости металлокомплексов карбоксилсодержащих полимеров
47	Острась Алексей Сергеевич	Diagnostics of halogen bond donors by NMR and IR spectroscopic parameters of phosphine oxides as probe acceptors
48	Парфенов Михаил Юрьевич	Квантово-химическое моделирование и исследование кислородных вакансий в наноразмерной частице TiO <sub>2</sub> модификация анатаз
49	Пыхова Анастасия Дмитриевна	CF <sub>2</sub> -функционализация триметаллнитридных эндоэдральных фуллеренов
50	Романова Ксения Андреевна	Применение квантово-химического моделирования для изучения оптических материалов на основе полупроводниковых квантовых точек и жидкокристаллических полимеров
51	Сагдеев Дмитрий Олегович	Фотокаталитические свойства квантовых точек Mn:CdS, стабилизированных тиогликолевой кислотой
52	Сапрыкин Роман Владимирович	Исследование механизма термических превращений ненасыщенных дикарбоксилатов никеля с использованием квантово-химических методов
53	Саттарова Алина Фанилевна	Квантово-химическое исследование молекулярных орбиталей метанофуллеренов [60]
54	Собалев Сергей Александрович	Электронные критерии пниктогенных связей в молекулярных кристаллах нитросоединений
55	Сотникова Ольга Анатольевна	Синтез и исследование молекулярно-плазмонных систем порфирина - наночастицы золота
56	Степанов Илья Георгиевич	Изучение продуктов лазерной абляции оксида алюминия и их классификация

57	Сыпко Тимофей Михайлович	Влияния заместителей на барьер внутреннего вращения и энергию активации переноса водорода в молекуле FOX-7 и его замещенных
58	Тевризов Никита Сергеевич	Электрофизические параметры тлеющего разряда атмосферного давления в смеси Ar-O <sub>2</sub>
59	Терашкевич Вера Андреевна	Кинетика образования молекулярного катиона ArH <sup>+</sup>
60	Терехова Екатерина Олеговна	Идентификация доноров и акцепторов водородной связи с помощью функции влияния
61	Томилко Анастасия Викторовна	Стерические эффекты в реакции гидролиза цефалоспориновых антибиотиков металло-β-лактамазой
62	Фархутдинова Дилара Айратовна	Фотофизические свойства модифицированных хромофоров зеленого флуоресцентного белка
63	Федотова Татьяна Владимировна	Фотоперенос электрона с эозина на европий в присутствии кукурбит[6-8]урилов в воде
64	Фионов Юрий Александрович	Парамагнитные комплексы 9,10-антрахинона с координационно-ненасыщенными катионами циркония на поверхности ZrO <sub>2</sub>
65	Флягина Ирина Сергеевна	Квантово-химическое моделирование адсорбционного понижения прочности силоксановой связи
66	Ходов Илья Анатольевич	Методологические приемы исследования сорбции полимеров в диоксиде углерода при сверхкритических параметрах состояния методами ЯМР спектроскопии
67	Цветкова Ольга Игоревна	Квантовохимический расчёт структуры и энергии изомерных форм N,N-диметилбигуанида
68	Чичерин Константин Алексеевич	Таутомерное равновесие в тримере 3,5-диметилпиразола
69	Щугорева Ирина Андреевна	Изучение оптических свойств сополифлуоренов квантово-химическими методами
70	Яковлева Юлия Андреевна	Исследование агрегации комплексов Pt(II) терпиридинов методом ЯМР-спектроскопии
71	Янкова Юлия Николаевна	Изучение действия электромагнитного поля на структуру белка квантово-химическими методами исследования