



## ПОДСЕКЦИЯ «Физическая химия I: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия» СПИСОК СТЕНДОВЫХ ДОКЛАДОВ

Требования к оформлению: постер формата А1 в вертикальной ориентации.

П10–1	<b>Квантово-химическое исследование влияния примесных атомов азота, ниобия и вакансий серы в дисульфиде молибдена на взаимодействие с литием</b> Алексеев Виктор Александрович, студент, 5 курс специалитета <i>ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия</i>
П10–2	<b>Влияние N-органического лиганда на магнитные свойства тетраэдрических галогенидов кобальта</b> Аничкин Артем Александрович, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, ФФХИ, Москва, Россия</i>
П10–3	<b>Динамика и структурные превращения системы алкогольдегидрогеназа-НАД, сорбированной на поверхности</b> Байгунов Иван Андреевич, аспирант, 2 год обучения <i>Государственный Университет «Дубна», Дубна, Россия</i>
П10–4	<b>Свойства циклических полимеров этиленоксида: метод молекулярной динамики</b> Бакулин Иван Константинович, аспирант, 2 год обучения <i>Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия</i>
П10–5	<b>Исследование комплексообразования стироловых красителей с куркурбитурилами в ДМСО методом <math>^1\text{H}</math> ЯМР-спектроскопии</b> Береговский Илья Геннадьевич, студент, 3 курс бакалавриата <i>Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия</i>
П10–6	<b>Конформеры L-глутамина в квантовой теории атомов в молекулах</b> Бойкова Софья Сергеевна, студент, 4 курс специалитета <i>Тверской государственный университет, химико-технологический факультет, Тверь, Россия</i>
П10–7	<b>Моделирование фотоэлектронных спектров анионных биохромофоров при двухфотонном резонансном возбуждении</b> Бойченко Антон Николаевич, молодой ученый <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–8	<b>Квантово-химическое исследование ароматичности и энергетических характеристик металлоценоэтиапорфиринов с Fe, Co<sup>+</sup>, Ru, Rh<sup>+</sup></b> Валиулина Ленера Ильмировна, аспирант, 1 год обучения <i>Томский государственный университет, физический факультет, Томск, Россия</i>





П10–9	<b>Теоретическое изучение окислительного присоединения к наночастицам палладия методом метадинамики</b> Власова Юлия Сергеевна, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–10	<b>Структурные особенности в исследовании биядерных фенилсодержащих карбоксилатных комплексов Cu(II)</b> Гизатов Руслан Рустамович, аспирант, 4 год обучения <i>Уфимский университет науки и технологий, химический факультет, Уфа, Россия</i>
П10–11	<b>Определение структурных параметров комплексов оксигемоглобина путем квантово-химического анализа спектров рентгеновского поглощения</b> Горячевский Александр Владимирович, лаборант-исследователь <i>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия</i>
П10–12	<b>Адаптация и применение методов искусственного интеллекта для исследования механизмов сверхбыстрых фотохимических реакций</b> Грановский Олег Михайлович, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–13	<b>Молекулярная фотоника комплексов бис-аза-18-краун-6-содержащих диенонов на основе циклоалканонов с солями алкандиамония</b> Гутров Виктор Николаевич, младший научный сотрудник <i>Центр фотохимии РАН ФГУ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия</i>
П10–14	<b>Молекулярно-динамическое моделирование сахарозы в водных растворах</b> Дещеня Владимир Игоревич, студент, 1 курс магистратуры <i>Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия</i>
П10–15	<b>Анализ водородных связей в гомомолекулярных кристаллах 2R,2R-1,3-пропандиолов</b> Доминник Ева Евгеньевна, студент, 3 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–16	<b>Верификация оценок энергии нулевых колебаний из свойств межатомных поверхностей</b> Дубасова Екатерина Владимировна, студент, 4 курс специалитета <i>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Высший химический колледж РАН, Москва, Россия</i>
П10–17	<b>Конформационный состав и молекулярная структура свободной молекулы 3,7,9-трис(трифторметилсульфонил)-3,7,9-триазабицикло[3.3.1]нонана</b> Ерошин Алексей Валерьевич, аспирант, 2 год обучения <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i>





П10–18	<b>Построение эффективных редуцированных вращательных гамильтонианов на основе численно-аналитической реализации операторной теории возмущений второго и четвертого порядков</b> Ефремов Илья Манович, аспирант, 1 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–19	<b>Механизмы трансформаций комплекса состава [Fe<sub>2</sub>(SC<sub>2</sub>N<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(NO)<sub>4</sub>] в растворе DMSO</b> Загайнова Евгения Александровна, студент, 3 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет ФФХИ, Москва, Россия</i>
П10–20	<b>Анализ и верификация 3-D структур белков теплового шока, ассоциируемых с сахарным диабетом 2 типа на основе методов МД-моделирования</b> Инькова Элина Викторовна, студент, 2 курс магистратуры <i>Университет «Дубна» (государственный университет «Дубна»), Дубна, Россия</i>
П10–21	<b>Квантово-химическое моделирование взаимодействия поверхностных агентов с квантовыми точками CdS</b> Исхаков Адиль Фанильевич, студент, 1 курс магистратуры <i>Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия</i>
П10–22	<b>Особенности протекания реакций фотоиндуцированного присоединения и деструкции 4-азидоанилина: квантовохимические расчеты</b> Карпушенкова Вероника Сергеевна, студент, 4 курс специалитета <i>Белорусский государственный университет, химический факультет, Минск, Республика Беларусь</i>
П10–23	<b>Theoretical investigation of CO<sub>2</sub> reduction reaction on copper and copper-tin single-atom</b> Кисленко Виталий Александрович, аспирант, 4 год обучения <i>Skolkovo Institute of Science and Technology (Skoltech), Moscow, Russia</i>
П10–24	<b>Использование грубозернистого приближения в методе молекулярной динамики для предсказания поведения ПАВ в двухфазной системе</b> Кисслер Трояна Юрьевна, студент, 3 курс бакалавриата <i>Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия</i>
П10–25	<b>Улучшение производительности фермионных нейронных сетей с помощью экспоненциального анзаца Слейтера</b> Кольченко Мария Михайловна, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–26	<b>Супрамолекулярные гомо- и гетеродимеры на основе стироловых красителей: комплексообразование и особенности фотореакций</b> Кондратенко Анастасия Дмитриевна, аспирант, 1 год обучения <i>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия</i>





П10–27	<b>Эволюция механизма ингибирования пенициллин-связывающих белков</b> Кривицкая Александра Вячеславовна, аспирант, 3 год обучения <i>ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Россия</i>
П10–28	<b>Влияние растворителя на реакционную способность анион-радикала нитросоединения</b> Левин Владислав Вадимович, студент, 4 курс специалитета <i>Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, химический факультет, Нижний Новгород, Россия</i>
П10–29	<b>Равновесная молекулярная структура 3,4-дицианофуроксана и ряда цианопиридинов по данным газовой электронографии</b> Лобанов Николай Валерьевич, аспирант, 4 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–30	<b>Влияние жесткости цепей на вертикальную сегрегацию смешанных полимерных щёток в селективном растворителе</b> Лукиев Иван Васильевич, студент, 2 курс магистратуры <i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО», Санкт-Петербург, Россия</i>
П10–31	<b>Gaussian process prediction of materials properties at the DFT accuracy limit</b> Макаров Эдгар Михайлович, аспирант, 4 год обучения <i>Skolkovo Institute of Science and Technology, Center for Energy Science and Technology, Moscow, Russia</i>
П10–32	<b>Оценка точности термодинамических расчетов методами квантовой химии</b> Мальцева Варвара Евгеньевна, студент, 4 курс бакалавриата <i>Санкт-Петербургский Государственный Технологический институт (технический университет), факультет химии веществ и материалов, Санкт-Петербург, Россия</i>
П10–33	<b>Исследование фотофизических свойств диметиламинозамещённых стироловых красителей и их комплексов с кукурбит[7,8]урилами</b> Медянцев Евгений Сергеевич, аспирант, 1 год обучения <i>Московский физико-технический институт, Москва, Россия</i>
П10–34	<b>Молекулярное моделирование реакции гидролиза органофосфатов в активном центре фосфотриэстеразы Sb-РТЕ</b> Мулашкина Татьяна Игоревна, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–35	<b>Исследование комплексообразования ароматических углеводов с <math>sp^2</math> и <math>sp</math>-линкерами с <math>\alpha</math>, <math>\beta</math>-циклодекстринами в растворах, гелях и кристалле</b> Новицкий Георгий Олегович, аспирант, 2 год обучения <i>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Центр фотохимии РАН, Москва, Россия</i>





П10–36	<p><b>Теоретическая оценка зависимости ионной проводимости литированной мембраны Нафион пластифицированной органическими растворителями</b></p> <p>Ошеров Петр Михайлович, студент, 2 курс магистратуры <i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Москва, Россия</i></p>
П10–37	<p><b>Новые подходы к ускорению сходимости итерационного решения уравнений метода связанных кластеров</b></p> <p>Румянцев Артем Сергеевич, студент, 4 курс бакалавриата <i>Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, Санкт-Петербург, Россия</i></p>
П10–38	<p><b>Квантово-химическое моделирование мезогенных комплексов европия(III) в качестве компонентов функциональных материалов</b></p> <p>Самойленко Александр Владимирович, студент, 1 курс магистратуры <i>Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия</i></p>
П10–39	<p><b>Квантово-химическое моделирование структуры и спектров пентафторированного дибензоилметаната дифторида бора, адсорбированного на силикагеле, и его эксиплексов с бензолом и толуолом</b></p> <p>Самолыга Александр Александрович, аспирант, 2 год обучения <i>Центр фотохимии Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, Москва, Россия</i></p>
П10–40	<p><b>Моделирование спектров поглощения флуоресцентных белков на основе распределения вариации дипольного момента при возбуждении</b></p> <p>Соловьева Мария Андреевна, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
П10–41	<p><b>Исследование структуры и фотоники бис(арилиден)-циклобутанонов и супрамолекулярных систем на их основе</b></p> <p>Старостин Роман Олегович, аспирант, 3 год обучения <i>Центр фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия</i></p>
П10–42	<p><b>Исследование энтальпии сублимации и поверхностной энергии кристаллов линейных аценов и олигофенилов</b></p> <p>Степко Анастасия Сергеевна, младший научный сотрудник <i>ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН</i></p>
П10–43	<p><b>Сложный характер внутреннего вращения в молекулах альдегидов, содержащих циклопропеновый фрагмент</b></p> <p>Стёпин Сергей Сергеевич, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
П10–44	<p><b>Кинетика плазменного фазового перехода в экспериментах с плотным флюидом молекулярного водорода: анализ основанный на первопринципной молекулярной динамике</b></p> <p>Федоров Илья Дмитриевич, аспирант, 3 год обучения <i>Московский физико-технический институт, Москва, Россия</i></p>







П10–45	<b>Оценка значимости явного учёта эффекта поляризации в эмпирических методах расчёта зарядов</b> Фролов Виталий Сергеевич, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–46	<b>Зависимость эффективности окислительной фотоконверсии зеленого флуоресцентного белка от длины волны возбуждения</b> Хайбрахманов Артур Ильнурович, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–47	<b>Влияние химических модификаций на механизмы релаксации электронно-возбужденного хромофора желтого фотоактивного белка</b> Чемяков Максим Сергеевич, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–48	<b>Заряды групп конформеров пропанола-1</b> Шебеченкова Александра Николаевна, студент, 4 курс специалитета <i>Тверской государственный университет химико-технологический факультет, Тверь, Россия</i>
П10–49	<b>Влияние толщины диэлектрического слоя на чувствительность трёхслойной системы металл-диэлектрик-металл с перфорированным металлическим слоем</b> Шокова Мария Андреевна, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П10–50	<b>Сравнение 2-оксипиррола и 4-винил-2-оксипиррола в квантовой теории атомов в молекулах</b> Щенухина Алина Сергеевна, студент, 1 курс магистратуры <i>Тверской государственный университет, химико-технологический факультет, Тверь, Россия</i>
П10–51	<b>Влияние диаметра пор цеолитов на энергию стабилизации переходного состояния взаимодействия циклогексадиена с акрилонитрилом</b> Якупов Искандер Шамилович, аспирант, 3 год обучения <i>Уфимский университет науки и технологий, химический факультет, Уфа, Россия</i>

