



## ПОДСЕКЦИЯ «Физическая химия I: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия» ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

Регламент: устные доклады – 8 мин, ответы на вопросы – 4 мин.

14 апреля, пятница химический факультет МГУ, преп. СХА Ведущий: н.с., Клещина Надежда Николаевна	
13:00–13:05	<b>Открытие подсекции “Физическая химия I”</b> к.ф.м.н., доц. Глебов Илья Олегович
13:05–13:17	<b>Молекулярно-динамическое моделирование активных центров в титансиликалите</b> Енбаев Захар Сергеевич, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
13:17–13:29	<b>Подключение двух дополнительных сечений поверхности потенциальной энергии процесса заторможенного внутреннего вращения вокруг связи C1-C9 винилциклопропана для оценки параметров спектров ЯМР</b> Маликов Алексей Андреевич, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
13:29–13:41	<b>Развитие методов расчета параметров спектров углового распределения фотоэлектронов</b> Козулин Константин Владимирович, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
13:41–13:52	<b>Теоретическая модель строения и свойств матрично-изолированной молекулы ВаF</b> Тупицын Дмитрий Ильич, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
13:52–14:07	<b>Модификация метода МКССП для моделирования электронных состояний в присутствии сильных магнитных полей</b> Бодунов Артем Андреевич, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





14:07–14:19	<b>Моделирование реакций активации молекулярного кислорода флавинами</b>  Одинцов Константин Викторович, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
14:19–14:31	<b>Сравнение ферментов фотоактивируемых аденилатциклаз из <i>Beggiatoa</i> и <i>Oscillatoria acuminata</i> методами молекулярного моделирования</b>  Курышкина Мария Сергеевна, аспирант, 1 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
14:31–14:42	<b>Оценка энергии межмолекулярных взаимодействий по данным монокристалльного рентгенодифракционного эксперимента</b>  Живописцев Михаил Алексеевич, аспирант, 4 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
14:42–15:00	Перерыв
15:00–15:12	<b>Моделирование механизма ацилирования глутамата в активном центре фермента N-ацетилглутаматсинтазы</b>  Блинова Анастасия Романовна, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:12–15:24	<b>Электронная структура молекулярных катионов, перспективных для прямого лазерного охлаждения</b>  Бруякин Юрий Владимирович, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:24–15:36	<b>Изучение механизма фотоактивации реакций гидридного сдвига</b>  Мезенцев-Черкес Иван Викторович, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:36–15:48	<b>Восстановление параметров эффективных колебательно-вращательных гамильтонианов на основе экспериментальных данных с использованием неэмпирического начального приближения</b>  Добролюбов Егор Олегович, аспирант, 1 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:48–16:00	<b>Моделирование неадиабатических процессов фотоионизации анионного хромофора зеленого флуоресцентного белка</b>  Белецан Олег Богданович, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





16:00–16:12	<b>Влияние структуры и конформационной подвижности активного центра на сечение двухфотонного поглощения флуоресцентного белка EGFP</b> <p style="text-align: right;">Аслоповский Владислав Романович, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:12–16:24	<b>Изучение механизма превращения аденозинтрифосфата в циклический аденозинмонофосфат в активном центре аденилатциклазы</b> <p style="text-align: right;">Степанюк Роман Алексеевич, аспирант, 1 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:24–16:36	<b>Моделирование одно- и двухфотонных спектров поглощения конформационно нежесткого внутриклеточного кальциевого индикатора в растворе</b> <p style="text-align: right;">Назарова Виктория Игоревна, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:36–17:00	<b>Подведение итогов. Награждение авторов лучших устных докладов.</b> <p style="text-align: right;">к.ф.м.н., доц. Глебов Илья Олегович</p>

**20 апреля, четверг**

химический факультет МГУ, холл 2 этажа

11:00–15:00	<b>Стендовая сессия</b>
15:00–15:10	<b>Подведение итогов. Награждение авторов лучших стендовых докладов. Закрытие подсекции.</b> <p style="text-align: right;">к.ф.м.н., доц. Глебов Илья Олегович</p>

