



ПОДСЕКЦИЯ
“Физическая химия I:
молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия”
ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

Регламент: 8 минут доклад и 4 минуты ответы на вопросы

13 апреля, среда

Zoom:

<https://us02web.zoom.us/j/82732286014?pwd=czVUUXZjdEVLMU5YTURWU1lvSVhQZz09>,
идентификатор 827 3228 6014, пароль 117424

Председатель: в.н.с. Ларин Александр Владимирович

Секретарь: н.с. Клещина Надежда Николаевна

11:55–12:00	Открытие подсекции “Физическая химия I” д.х.н., в.н.с. Ларин Александр Владимирович
12:00–12:12	Роль электронно-возбужденных состояний в процессе эмиссии фотоэлектронов биологических хромофоров Бойченко Антон Николаевич (аспирант, 4 год обучения) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
12:12–12:24	Моделирование электронной структуры молекулярного иона PaO^+ для поиска новой физики Макинский Дмитрий Александрович (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия</i>
12:24–12:36	Моделирование электронных уровней атомов II периода в присутствии сильных магнитных полей Бодунов Артем Андреевич (аспирант, 1 год обучения) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
12:36–12:48	Роль электронной обменной корреляции в кето-енольной таутомерии Левина Елена Олеговна (аспирант, 4 год обучения) <i>Московский физико-технический институт, Москва, Россия Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва, Россия</i>





12:48–13:00	<p>Механизм колебательной автоэмиссии электронов из электронно-возбужденных состояний молекулярных анионов</p> <p>Белецан Олег Богданович (студент, 4 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:00–13:12	<p>Структура и спектры эксиплексов дибензоилметаната дифторида бора, адсорбированного на силикагеле, с бензолом и толуолом по данным квантовохимических расчётов</p> <p>Самолыга Александр Александрович (аспирант, 1 год обучения) <i>Центр фотохимии Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия Московский физико-технический институт, кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники, Москва, Россия</i></p>
13:12–13:24	<p>Дизайн сольватохромного флуоресцентного красителя на основе модифицированного хромофора белка GFP</p> <p>Фархутдинова Дилара Айратовна (аспирант, 1 год обучения) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:24–13:36	<p>Моделирование квазиadiaбатического перехода протона и оценка H/D изотопных эффектов в гомосопряженных анионах фосфорсодержащих кислот</p> <p>Чакалов Эдем Рустемович (студент, 2 курс магистратуры) <i>Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия</i></p>
13:36–13:48	<p>Моделирование процессов электронной релаксации возбуждённых состояний органических хромофоров</p> <p>Синенко Григорий Дмитриевич (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:48–14:00	<p>Изучение особенностей реакций гидрирования ненасыщенных углеводов параводородом</p> <p>Связов Сергей Владимирович (студент, 5 курс специалитета) <i>Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия Институт «Международный томографический центр» СО РАН, Новосибирск, Россия</i></p>
14:00–14:12	Перерыв
14:12–14:24	<p>Влияние окружения хромофора на сечение двухфотонного поглощения белка EGFP</p> <p>Аслоповский Владислав Романович (студент, 4 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>





14:24–14:36	<p>Разработка алгоритма быстрого расчета констант скоростей неадиабатических переходов с аппроксимацией части колебательных мод</p> <p>Мартынов Артур Ильич (аспирант, 4 год обучения) <i>Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Россия</i></p>
14:36–14:48	<p>Развитие методов расчёта оптических спектров комплексобразующего внутриклеточного индикатора кальция Fura-2 в растворе</p> <p>Волдаева Ольга Николаевна (студент, 2 курс магистратуры) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия</i></p>
14:48–15:00	<p>Электронная структура и оптические свойства спироборатов</p> <p>Сидорин Андрей Евгеньевич (аспирант, 4 год обучения) <i>Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия</i></p>
15:00–15:12	<p>Связь динамики фотохромных реакций на ранних временах со структурой активного центра в различных микробиальных и животных родопсинах</p> <p>Кусочек Павел Александрович (молодой ученый) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
15:12–15:24	<p>Расчёт параметров спектров электронного парамагнитного резонанса и кинетических характеристик матрично-изолированных атомов 1A</p> <p>Измоденов Даниил Витальевич (студент, 6 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
15:24–15:36	<p>Молекулярное моделирование реакции гидролиза в активном центре фосфотриэстеразы Pd-PTE</p> <p>Мулашкина Татьяна Игоревна (аспирант, 1 год обучения) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
15:36–15:48	<p>Гигантское комбинационное рассеяние сульфо-цианиновых красителей на золотых наностержнях</p> <p>Шевчук Алиса Игоревна (студент, 4 курс) <i>Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия</i></p>
15:48–16:00	<p>Расчет одночастичных молекулярных свойств методом связанных кластеров с применением теории отклика</p> <p>Алексеев Иван Сергеевич (студент, 5 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>





20 апреля, среда

Zoom:

<https://us02web.zoom.us/j/84204310464?pwd=R0Z1VGVEKzZuZENyNFRyblZNeJlJrUT09>,
идентификатор 842 0431 0464, пароль 362336

Председатель: в.н.с. Ларин Александр Владимирович**Секретарь:** н.с. Клецина Надежда Николаевна

12:00–12:12	Изучение особенностей реакций гидрирования ненасыщенных углеводов параводородом Связов Сергей Владимирович (студент, 5 курс специалитета) <i>Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия</i> <i>Институт «Международный томографический центр» СО РАН, Новосибирск, Россия</i>
12:12–12:15	Определение ориентационной упорядоченности слоев в мембране из оксида графита методом спинового зонда Матвеев Михаил Владимирович (студент, 3 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,</i> <i>химический факультет, Москва, Россия</i>
12:15–12:18	Конформационный анализ 1-метил-1,3,5-трисилациклогексана Кузьмина Любовь Евгеньевна (аспирант, 4 год обучения) <i>Ивановский государственный химико-технологический университет,</i> <i>факультет неорганической химии и технологии, Иваново, Россия</i>
12:18–12:21	Конформационный анализ 3,7-(окса/тия)-дигетероаналогов бицикло[3.3.1]нонана Бойченко Иван Владимирович (студент, 4 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,</i> <i>химический факультет, Москва, Россия</i>
12:21–12:24	Молекулярно-динамическое исследование ориентации алкогольдегидрогеназы на поверхности графитоподобного сорбента Байгунов Иван Андреевич (аспирант, 1 год обучения) <i>Государственный Университет «Дубна», Дубна, Россия</i>
12:24–12:27	Квантово-химическое исследование водородносвязанных комплексов арсиновой кислоты H_2AsO_3H и их изменение в неспецифично сольватируемой среде Коростелев Владислав Олегович (студент, 2 курс магистратуры) <i>Санкт-Петербургский государственный университет,</i> <i>Институт химии, Санкт-Петербург, Россия</i>
12:27–12:30	Гетерометаллические терефталаты европия-лютеция: фазовый состав и люминесцентные свойства Носов Виктор Геннадиевич (студент, 2 курс бакалавриата) <i>Санкт-Петербургский государственный университет,</i> <i>институт химии, Санкт-Петербург, Россия</i>





12:30–12:33	<p>Эффективность усиления флуоресценции анизотропными наночастицами с несколькими плазмонными модами при двухфотонном возбуждении</p> <p>Шокова Мария Андреевна (студент, 3 курс специалитета) <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
12:33–12:36	<p>Магнитно-структурные корреляции в пиридил-замещённых нитронилнитроксильных радикалах</p> <p>Чернавин Платон Александрович (студент, 1 курс магистратуры) <i>Институт "Международный томографический центр" СО РАН, Новосибирск, Россия «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет», Новосибирск, Россия</i></p>
12:36–12:40	<p>Закрытие подсекции "Физическая химия I"</p> <p>д.х.н., в.н.с. Ларин Александр Владимирович</p>

