



ЛОМОНОСОВ-2020 СЕКЦИЯ 'ХИМИЯ' 10–27 НОЯБРЯ 2020



Подсекция "Физическая химия I: Молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия"

ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

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

17 ноября, вторник

Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/85810576263?pwd=eIFkZkhwM2xGbnErZW5CZWV2d0VaQT09>
идентификатор **858 1057 6263** пароль **756957**

Председатель: д.х.н., в.н.с. Курамшина Гульнара Маратовна

Секретарь: к.х.н., ст.преп. Колесникова Инна Николаевна

14:30–14:35	Открытие подсекции "Физическая химия I" д.х.н., в.н.с. Курамшина Гульнара Маратовна
14:35 – 14:50	Молекулярно-динамическое моделирование суспензии одностенных углеродных нанотрубок в 2-пирролидоне Алешонкова Александра Андреевна (студент) <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i>
14:50 – 15:05	Квантово-химическое моделирование адсорбции метанола на кластерах оксида ванадия Андреева Юлия Александровна (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:05 – 15:20	Исследование влияния меди на каталитические свойства кластеров золота, стабилизированных тиолатными лигандами, в окислении СО Бандурист Павел Сергеевич (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>

15:20 – 15:35	<p>Моделирование спектров многофотонной ионизации хромофора зеленого флуоресцентного белка в водном окружении</p> <p>Бойченко Антон Николаевич (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
15:35 – 15:50	<p>Структурная нежесткость димерных комплексов карбоновых кислот и температура изотропизации</p> <p>Бубнова Ксения Евгеньевна (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
15:50 – 16:05	<p>Исследование строения возбуждённых состояний в незамещённых и фторированных аналогах стильбена на основе пиррола</p> <p>Булатова Арина Андреевна (студент) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:05 – 16:20	<p>Расчет профилей свободной энергии методом КМ/ММ МД</p> <p>Капуста Дмитрий Павлович (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:20 – 16:35	<p>Квантово-механический расчет как метод прогнозирования реакционной способности смешанных фосфониево-йодониевых илидов в реакциях гетероциклизации</p> <p>Вознярский Андрей (студент) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
16:35 – 16:45	Перерыв
16:45 – 17:00	<p>Моделирование влияния среды на фотофизические свойства внутриклеточного кальциевого индикатора на основе флуоресцентного красителя Fura-2</p> <p>Волдаева Ольга Николаевна (студент) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова Физический факультет, Москва, Россия</i></p>
17:00 – 17:15	<p>Исследование электрических свойств молекул фторфуллерена в островковых пленках</p> <p>Горячевский Александр Владимирович (аспирант) <i>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Курчатовский институт, Москва, Россия</i></p>
17:15 – 17:30	<p>Фотопроцессы бис-диаминобензилиденциклобутанона в ацетонитриле</p> <p>Гутров Виктор Николаевич (аспирант) <i>Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника», РАН, Москва, Россия</i></p>

17:30 – 17:45	<p>Моделирование влияния π-стэкинг взаимодействий на энергию вертикальных переходов в органических хромофорах</p> <p>Захарова Татьяна Максимовна (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
17:45 – 18:00	<p>Исследование механизма термической изомеризации хромофорной группы белков зрительной рецепции</p> <p>Кабылда Адиль Муратович (студент) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
18:00 – 18:15	<p>Исследование триплетных состояний димеров полиметиновых красителей</p> <p>Федотова Татьяна Владимировна (аспирант) <i>Московский физико-технический институт, Москва, Россия</i></p>

18 ноября, среда

Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/88606468875?pwd=R0ppdGdIMmZ1cDUrK0U1Uk9SVFZzUT09>
идентификатор **886 0646 8875** пароль **528231**

Председатель: д.х.н., в.н.с. Курамшина Гульнара Маратовна

Секретарь: к.х.н., ст.преп. Колесникова Инна Николаевна

11:00 – 11:15	<p>Геометрическое и электронное строение 5,10,15,20-тетрафенилпорфирина платины(II)</p> <p>Курочкин Иван Юрьевич (аспирант) <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i></p>
11:15 – 11:30	<p>Исследование структурной гетерогенности активного центра бактериальных родопсинов</p> <p>Кусочек Павел Александрович (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
11:30 – 11:45	<p>Исследование влияния заместителей на природу водородной связи N...N в комплексах метанол-имидазол</p> <p>Терехова Екатерина Олеговна (студент) <i>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Факультет естественных наук (ФЕН), Москва, Россия</i></p>
11:45 – 12:00	<p>Исследование механизмов безызлучательной релаксации модифицированных хромофоров зеленого флуоресцентного белка</p> <p>Фархутдинова Дилара Айратовна (студент) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>

12:00 – 12:15	<p>Влияние электронной делокализации на механизм гидролиза имипенема металло-β-лактамазами L1 и NDM-1</p> <p>Левина Елена Олеговна (аспирант) <i>Московский физико-технический институт, Москва, Россия</i></p>
12:15 – 12:30	<p>Принципы многомасштабного моделирования цистеин-серебряного раствора</p> <p>Малышев Максим Дмитриевич (аспирант) <i>Тверской государственный университет, Тверь, Россия</i></p>
12:30 – 12:45	<p>Низколежащие возбужденные (π-σ^*) состояния тетрагидрофульвалена</p> <p>Мартынов Артур Ильич (аспирант) <i>Московский государственный институт электронной техники (Технический университет) (МИЭТ), Москва, Россия</i></p>
12:45 – 13:00	<p>Взаимосвязь квантового выхода флуоресценции белков семейства iLOV и рассчитанных методами молекулярного моделирования</p> <p>Метелешко Юлия Игоревна (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:00 – 13:15	<p>Неэмпирические расчеты параметров сверхтонкого взаимодействия в димерах щелочных металлов</p> <p>Олейниченко Александр Витальевич (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:15 – 13:30	<p>Компьютерное моделирование модификации электронной структуры металл-органических каркасов</p> <p>Сызганцева Мария Алексеевна (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:30 – 13:45	<p>Моделирование вращательных и колебательно-вращательных спектров изотопомеров радикала CN на основании неэмпирических расчетов и экспериментальных данных</p> <p>Терашкевич Вера Андреевна (аспирант) <i>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i></p>
13:45– 13:55	Перерыв
13:55– 14:10	<p>Подведение итогов. Закрытие подсекции.</p> <p>д.х.н., в.н.с. Курамшина Гульнара Маратовна</p>