



**XXVII Всероссийская конференция  
молодых ученых-химиков  
(с международным участием)**

**16-18 апреля 2024 года, г. Нижний Новгород  
ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Национальный исследовательский  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**XXVII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ  
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)**

*Нижегород, 16-18 апреля 2024 г.*

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Нижегород  
Издательство Нижегородского государственного университета  
2024

УДК 54  
ББК 24  
Д 22

**XXVII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием): тезисы докладов** (Нижний Новгород, 16–18 апреля 2024 г.). Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2024. – 740 с.

ISBN 978-5-91326-881-5

В сборник включены тезисы докладов XXVII Всероссийской конференции молодых учёных-химиков (с международным участием). В ежегодных конференциях, проходящих в Университете Лобачевского, участвуют молодые ученые, аспиранты, студенты и школьники. Эти конференции способствуют активизации научно-исследовательской деятельности молодых ученых и специалистов, расширению их научного кругозора и связей между различными научными направлениями, обмену актуальной информацией, выявлению инновационного потенциала молодежи, расширению связей между наукой и производством.

ISBN 978-5-91326-881-5

УДК 54  
ББК 24

Электронная версия сборника тезисов докладов на сайте:  
<http://www.youngchem-conf.unn.ru/>

© Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского, 2024

**Исследование влияния квантового запутывания на двухфотонное поглощение зелёного флуоресцентного белка**

Аслоповский В.Р., Щербинин А.В., Боченкова А.В.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: aslopovskiyvladislav@gmail.com*

Скорость поглощения пар квантово-запутанных (коррелированных) фотонов линейно зависит от плотности потока, тогда как в случае классического двухфотонного поглощения эта зависимость является квадратичной; это позволяет проводить спектроскопические измерения при значительно меньших интенсивностях возбуждающего света. Такая особенность поглощения пар коррелированных фотонов может найти применение в ситуациях, когда существует риск фотообесцвечивания и других видов повреждения образцов, в частности при исследовании биологических объектов. Целью данной работы является разработка методики расчета сечений двухфотонного поглощения запутанных пар фотонов и анализ факторов, влияющих на его величину.

В данной работе построены полноатомные модели белка EGFP и его модификации EGFP T203I и получены их молекулярно-динамические траектории в NPT-ансамбле при 298 К с последующим охлаждением до 1 К. Оптимизация геометрии полученных структур проводилась методом КМ/ММ в варианте PBE0/(aug)-cc-pVDZ//CHARMM. Квантовая часть включает в себя хромофор и его ближайшее окружение. Энергии вертикальных электронных переходов рассчитаны методом ХМCQDPT2 в базисе (aug)-cc-pVDZ с векторами нулевого приближения, полученными методом SA(7)-CASSCF(14,13). Расчет моментов перехода и разности средних дипольных моментов проведен в нулевом порядке этой теории. Электростатическое поле белкового окружения учитывалось методом потенциалов эффективных фрагментов (EFP). Зависимости вероятностей двухфотонного поглощения (ДФП) пар коррелированных фотонов от времени их запутывания для первых трех переходов в белках EGFP и EGFP T203I рассчитаны путем прямого суммирования по состояниям в условиях двухфотонного резонанса и вырожденности фотонов по энергии. Показано, что для перехода  $S_0 \rightarrow S_1$  зависимость вероятности ДФП пар коррелированных фотонов от времени запутывания быстро осциллирует на фемтосекундных временах, при этом пиковое и среднее (по времени запутывания) значения вероятности ДФП оказываются на порядки большими по сравнению с поглощением некоррелированных пар фотонов и определяются другими факторами, поэтому эффект от замены T203I оказывается прямо противоположным. В случае более высоко лежащих переходов наблюдается более сложная зависимость вероятности ДФП от времени запутывания, что связано с большим числом каналов перехода и их интерференцией, при этом также наблюдается значительное усиление поглощения по сравнению с классическим случаем.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-13-00126.