



ПОДСЕКЦИЯ «Квантовая химия и строение молекул»

СПИСОК СТЕНДОВЫХ ДОКЛАДОВ

Требования к оформлению: постер формата А1 в вертикальной ориентации.

Студенты

П06-1	Можно ли доверять изодесмическим реакциям и выводам, сделанным на их основе? Антаньязов Михаил Романович, студент, 2 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П06-2	Первопринципное моделирование адсорбции и рекомбинации водорода и H_3O^+ на поверхностях Pt_1, Pt_{13}, Pt_{14} вблизи однослойного графена Смирнов Сергей Артёмович, студент, 2 курс бакалавриата <i>Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт», Москва, Россия</i>
П06-3	Влияние фторирования на свойства тиофен-фениленовых со-олигомеров с аннелированным центральным фрагментом: исследование методом теории функционала плотности Корчкова Софья Никитична, студент, 3 курс бакалавриата <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет ФФХИ, Москва, Россия</i>
П06-4	Молекулярное моделирование реакции гидролиза АТФ в активном центре миозина Мирошниченко Кирилл Дмитриевич, студент, 3 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П06-5	Новый алгоритм для расчета контактного угла бинарных смесей в нанопорах Семенчук Алексей Андреевич, студент, 3 курс бакалавриата <i>Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия</i>
П06-6	Создание силовых полей для моделирования нанотрубок WS_2 Станиславчук-Абовский Дмитрий Борисович, студент, 3 курс бакалавриата <i>Санкт-Петербургский государственный университет, химический факультет, Санкт-Петербурге, Россия</i>
П06-7	Эксперимент, квантово-химическое моделирование TDDFT-спектров и анализ орбиталей, участвующих в электронных переходах, комплекса состава $[\text{Fe}_2(\text{SC}_2\text{N}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2)_2(\text{NO})_4]$ в растворе DMSO Загайнова Евгения Александровна, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет ФФХИ, Москва, Россия</i>
П06-8	Молекулярное моделирование реакции фосфорилирования в активном центре протеинкиназы Леонова Микаэлла Сергеевна, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





П06-9	Квантово-химическое исследование механизма IEDDA-реакции с имин-енаминами Проломов Илья Викторович, студент, 5 курс специалитета <i>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия</i>
П06-10	Моделирование структуры неграфитизируемого углерода как анодного материала для натрий-ионных аккумуляторов в рамках метода DFT Соловьева Мария Андреевна, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П06-11	Использование свёрточных нейронных сетей для решения практических задач порошковой рентгеновской дифракции Хайбрахманов Артур Ильнурович, студент, 5 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П06-12	КР-спектроскопия и квантово-химический расчет 1,3,5-трифенилформаза, адсорбированного на металлических поверхностях Арсентьев Сергей Сергеевич, студент, 2 курс магистратуры <i>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, физический факультет, Нижний Новгород, Россия</i>
П06-13	Предсказание фотофизических свойств элементоорганических соединений с помощью алгоритмов машинного обучения Ильин Егор Александрович, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П06-14	Квантово-химические исследования электронной структуры астрономически интересных молекул: NH₂, SO₂, OH₂, CN Паханьян Игорь Михайлович, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>

Аспиранты

П06-15	Изучение ароматичности циклоуглеродов с нечетным числом атомов Валиулина Ленара Ильмировна, аспирант, 2 год обучения <i>Томский государственный университет, физический факультет, Томск, Россия</i>
П06-16	Анализ экспериментальных и вариационных энергий колебательно-вращательных состояний второй полиады D₂¹⁶O методом эффективных колебательно-вращательных гамильтонианов уотсоновского типа Добролюбов Егор Олегович, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
П06-17	Неэмпирический расчет эффективных вращательных гамильтонианов центробежного искажения с учетом оптичных постоянных на основе операторной теории возмущений для молекул орторомбической и моноклинной симметрии Ефремов Илья Манович, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





П06–18	Квантовохимическое исследование электронной структуры эндометаллофуллерена иттербия Yb@C₆₀ и его гидроксильированных производных Макинский Дмитрий Александрович, аспирант, 2 год обучения <i>НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия</i>
П06–19	Theoretical investigation of alkaline and alkaline-earth metals complexation with dibenzocrown ethers in fluorinated diluents Острась Алексей Сергеевич, аспирант, 2 год обучения <i>Infochemistry Scientific Center, ITMO University, St. Petersburg, Russia</i>
П06–20	Квантово-химическое моделирование переноса протона в потенциально мезогенных комплексах на основе сульфокислот и производных пиридина Филиппов Александр Андреевич, аспирант, 2 год обучения <i>Ивановский государственный университет, институт математики, информационных технологий и естественных наук, Иваново, Россия</i>
П06–21	Некоторые особенности внутреннего вращения в молекулах, содержащих трехчленный цикл Стёпин Сергей Сергеевич, аспирант, 3 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>

