



Международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ – 2021

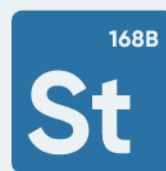
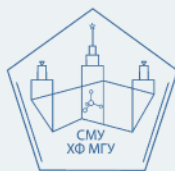
Секция «Химия»

12–23 апреля 2021

Материалы конференции



lomonosov2021.chem.msu.ru



УДК 54
ББК 24я43
М34

Отв. ред.: Дзубан А.В., Коваленко Н.А.

М34 **Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2021», секция «Химия».** – М.: Издательство «Перо», 2021. – 80 МБ. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00189-092-8

ISBN 978-5-00189-092-8

УДК 54
ББК 24я43

© Авторы статей, 2021



О КОНФЕРЕНЦИИ

В 2021 году традиционная **Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов»** проходила с 12 по 23 апреля в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова в рамках Международного молодёжного научного форума «Ломоносов». Председателем центрального оргкомитета является ректор МГУ академик Виктор Антонович Садовничий.

Основная цель конференции «Ломоносов» – развитие творческой активности студентов, аспирантов и молодых учёных, привлечение их к решению актуальных задач современной науки, сохранение и развитие единого международного научно-образовательного пространства, установление контактов между будущими коллегами.

Для участия в конференции приглашались студенты (специалисты, бакалавры или магистры), аспиранты, соискатели и молодые учёные (без степени кандидата наук) любой страны мира в возрасте до 35 лет (включительно) – учащиеся или сотрудники российских и зарубежных вузов, аспиранты и сотрудники научных учреждений.

Официальные языки конференции: русский и английский.

В 2021 году работа конференции проходила по 41 секции, отражающей все основные направления современной фундаментальной и прикладной науки.

Секция «Химия» традиционно включала в себя следующие подсекции:

1. *Аналитическая химия*
2. *Высокомолекулярные соединения*
3. *Дисперсные системы и поверхностные явления*
4. *История химии*
5. *Катализ*
6. *Неорганическая химия I (студенты)*
7. *Неорганическая химия II (аспиранты и молодые учёные)*
8. *Органическая химия*
9. *Радиохимия и радиоэкология*
10. *Физическая химия I: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия*
11. *Физическая химия II: химическая термодинамика и химическая кинетика*
12. *Физическая химия III: процессы с участием ионов и радикалов в конденсированных средах и на межфазных границах (электрохимия, химия высоких энергий, спиновая химия)*
13. *Химическая технология и новые материалы*
14. *Химия живых систем, нанобиоматериалы и нанобиотехнологии*

Было подано 1532 заявки, принято 1372, из них 582 устных доклада и 790 стендовых. 1199 авторов приняли участие.

Секция «Химия» в 2021 году работала дистанционно (с помощью платформы Zoom) с частично очным участием (только устных докладов и на отдельных подсекциях). **Стендовые сессии** проходили в формате заочного обсуждения постеров на сайте секции. В некоторых подсекциях были организованы дополнительные видеоконференции в Zoom с устным обсуждением стендовых докладов.

Вся информация о содержании секции «Химия» и итогах её работы доступна на сайте <https://lomonosov2021.chem.msu.ru>.





ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель: Калмыков Степан Николаевич, *чл.-корр. РАН, проф., декан химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

Заместитель председателя: Зверева Мария Эмильевна, *д.х.н., доц., зам. декана химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова по научной работе*

Авдеев Виктор Васильевич, *д.х.н., проф.*

Белоглазкина Елена Кимовна, *д.х.н., проф.*

Клячко Наталья Львовна, *д.х.н., проф.*

Матвеевко Владимир Николаевич, *д.х.н., проф.*

Цирлина Галина Александровна, *д.х.н., проф.*

Ларин Александр Владимирович, *д.х.н., в.н.с.*

Бадун Геннадий Александрович, *к.х.н., доц.*

Богатова Татьяна Витальевна, *к.х.н., доц.*

Глебов Илья Олегович, *к.ф.-м.н., доц.*

Ефимова Анна Александровна, *к.х.н., доц.*

Истомин Сергей Яковлевич, *к.х.н., доц.*

Касьянов Иван Алексеевич, *к.х.н., доц.*

Розова Марина Геннадьевна, *к.х.н., доц.*

Ставрианиди Андрей Николаевич, *к.х.н., доц.*

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель: Калмыков Степан Николаевич, *чл.-корр. РАН, проф., декан химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

Заместитель председателя: Зверева Мария Эмильевна, *д.х.н., доц., зам. декана химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова по научной работе*

Якубович Екатерина Вячеславовна, *к.х.н., начальник научного отдела химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

Ученый секретариат:

Коваленко Никита Андреевич, *к.х.н., доц., председатель совета молодых учёных химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

Дубинина Татьяна Валентиновна, *к.х.н., с.н.с.*

Дзубан Александр Владимирович, *м.н.с.*

Карпушкин Евгений Александрович, *к.ф.-м.н., доц.*

Беркович Анна Константиновна, *к.х.н., с.н.с.*

Комкова Мария Андреевна, *к.х.н., с.н.с.*

Пуголовкин Леонид Витальевич, *к.х.н., н.с.*

Жуковская Евгения Сергеевна, *к.х.н.*

Клещина Надежда Николаевна, *к.х.н.*

Шнитко Алексей Валерьевич, *к.х.н.*

Смирнов Сергей Александрович, *н.с.*

Никифоров Александр Игоревич, *м.н.с.*

Владимирова Надежда Владимировна

Строганова Екатерина Андреевна





Симуляция спектров поглощения и флюоресценции производных азулена с учётом их колебательного разрешения

Козина Д.О., Порсев В.В.

Студент, 1 курс магистратуры

*Санкт-Петербургский государственный университет,
институт химии, Санкт-Петербург, Россия*

E-mail: kozina.d@yandex.ru

В последнее время азулен стал популярной структурой для исследования его фотофизических свойств, что связано, главным образом, с его способностью к флюоресценции против правила Каша. Эта уникальная особенность позволяет использовать производные азулена в биоимиджинге, а также в качестве органических светодиодов (OLED), молекулярных переключателей и т.д. Важным оказывается изучить, как влияют пространственные и донорно-акцепторные свойства заместителей в азулене на цвет и интенсивность поглощения и люминесценции его производных. Это позволит контролировать эти свойства: «подбирать» излучательный канал и «настраивать» цвет излучения. Однако, существует проблема – простая симуляция спектров поглощения и испускания методом временно-зависимой теории функционала плотности (TD DFT) не позволяет различить в спектрах интенсивности полос, отвечающих различным переходам, кроме того она не описывает колебательное разрешение. Нами был использован метод, основанный на Франк-Кондоновском принципе оценки интенсивности переходов между колебательными состояниями молекулы, который позволяет решить обе описанные проблемы [1].

В данной работе изучены 3 серии производных азулена: с донорным –OMe заместителем и акцепторным –CN у каждого атома углерода азуленовой системы, а также серия производных, в которых атом углерода в сопряжённой системе был заменён на атом азота. Для этих серий рассчитаны спектры поглощения и флюоресценции, соответствующие переходам между основным и первым и вторым возбуждёнными синглетными состояниями. Полученные спектры демонстрируют согласие формы линий и их интенсивности с экспериментальными результатами. Кроме того, были проанализированы сдвиги максимумов и изменение формы спектров в сериях, а также колебания, отвечающие наиболее интенсивным переходам.

Исследование выполнено с использованием оборудования ресурсного центра «Вычислительный центр» СПбГУ, при поддержке гранта РФФИ 19-73-20055.

Литература

1. Barone V., Bloino J., Biczysko M. *Vibrationally-resolved electronic spectra in GAUSSIAN 09 // GAUSSIAN 09 Revision A.02. 2009.*





**Материалы Международной научной конференции
студентов, аспирантов и молодых учёных
«Ломоносов-2021», секция «Химия»**

Издательство «Перо»

109052, Москва, Нижегородская ул., д. 29-33, стр. 27, ком. 105

Тел.: (495) 973-72-28, 665-34-36

Подписано к использованию 26.04.2021.

Объем 80 Мбайт. Электрон. текстовые данные.(CD-ROM).

Заказ 354.