



Куликова Яна Игоревна

Бакалавриат 2019-2023

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева»,  
естественнонаучный институт, химический факультет,  
кафедра неорганической химии.

ВКР:

«Невалентные взаимодействия в структурах молекулярных галогенидов элементов 14 группы», научный руководитель к.х.н., доцент Карасев М.О.

Цель работы: выявить взаимосвязь между симметрией молекулы – симметрией ее позиции – симметрией кристалла в тетраэдрически построенных галогенпроизводных молекул элементов 14 группы.

В ходе работы была сформирована база в программе TOPOS, содержащая сведения о строение кристаллов галогенпроизводных 14 группы. Также установлены позиции молекул в структурах кристаллов. С помощью метода полиэдра Вороного-Дирихле были рассчитаны межмолекулярные и внутримолекулярные взаимодействия в данных структурах кристаллов, а также выявлены специфические взаимодействия, реализующиеся между атомами галогенов.

Магистратура 2023-2025

«Санкт-Петербургский государственный университет», институт химии, химический факультет, кафедра общей и неорганической химии, научная группа «Группа донорно-акцепторных взаимодействий».

ВКР:

«Комплексы галогенов и двухатомных интергалогенидов с кислотами Льюиса», руководитель к.х.н., профессор Тимошкин А.Ю.

Цель работы: выявить условия генерации  $\text{Hal}^+$  в результате взаимодействия галогенов/двухатомных интергалогенидов с кислотами Льюиса различной акцепторной способности.

Задачи:

1. Провести квантово-химические расчеты (оптимизация геометрии, расчет термодинамических характеристик) молекулярных и ионных комплексов галогенов/двухатомных интергалогенидов с кислотами Льюиса различной акцепторной способности;
2. Для наиболее перспективных систем провести синтез комплексов и установить их структуру методом РСА монокристаллов.