

Образование: Институт химии СПбГУ, кафедра физической органической химии.

ВКР: «Исследование электронного строения и ЯМР параметров комплексов с центрально-симметричными водородными связями методами квантовой химии».

Научные группы бакалавриата:

- Научная группа д.х.н., профессора кафедры химии и технологии азот-содержащих органических соединений СПбГТИ (ТУ), Трифонова Р.Е.
- «Лаборатория невалентных взаимодействий», к.ф.-м.н., старший преподаватель кафедры физической органической химии СПбГУ, Тупикина Е.Ю.

Планируемые научные группы магистратуры:

- «Лаборатория невалентных взаимодействий», к.ф.-м.н., старший преподаватель кафедры физической органической химии СПбГУ, Тупикина Е.Ю.

Описание работы в бакалавриате и магистратуре:

В бакалавриате моим основным направлением работы было квантово-химическое и молекулярно-динамическое моделирование молекулярных систем с водородной связью в программах Gaussian16, CP2K, MultiWFN и др. Вместе с научными руководителями мы исследовали прочность и геометрию водородных связей в растворах, и анализировали проявления водородной связи в спектрах ИК и ЯМР ^1H .

В магистратуре я продолжу работать в этом направлении под руководством Тупикиной Елены Юрьевны. В наших планах описать роль невалентных взаимодействий в каталитическом цикле РНКазы А, используя методологию Борн-Оппенгеймеровской *ab initio* молекулярной динамики.



Капланский Марк