

Титова Анна Александровна

Личная информация

Дата рождения: 12 октября 2000

Адрес: г. Санкт-Петербург, пр. Университетский, 26,
каб. 2126

Адрес электронной почты: aatitova1210@gmail.com



Образование

Бакалавр химии, специальность 04.03.01 – Химия, Институт химии
СПбГУ

Тема выпускной квалификационной работы: «Исследование
взаимного влияния водородных связей $NH\cdots N$ в гетеродимерах
замещённых диаминопиридинов методами квантовой химии»,
кафедра ФОХ

Научный руководитель: ст.преп., к.ф.-м.н. Тупикина Е.Ю.

Научные интересы

Квантовая химия комплексов, содержащих невалентные
взаимодействия: геометрические, энергетические, спектральные
параметры и их связь с прочностью невалентных взаимодействий.

Публикации

1. Tupikina, E. Y., Tolstoy, P. M., Titova, A. A., Kostin, M. A. & Denisov, G. S. Estimations of $FH\cdots X$ hydrogen bond energies from IR intensities: logansen's rule revisited. *J. Comput. Chem.* 564–571 (2021).
2. Tupikina, E. Y., Titova, A. A., Kaplanskiy, M.V., Chakalov, E.R., Kostin, M. A., Tolstoy, P. M. Estimations of $OH\cdots N$ hydrogen bond length from positions and intensities of IR bands. *Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 275, 121172 (2022).