

Карпов Валерий

Бакалавриат СПбГУ (2020 год выпуска)

Бакалавриат:

Кафедра Квантовой химии, Лаборатория квантовой химии наноструктур

научный руководитель – Бандура Андрей Вилович

Тема ВКР – «Неэмпирические расчеты устойчивости, электронных и фононных свойств монослоёв и нанотрубок на основе халькогенидов галлия(II)»



Магистратура:

Кафедра Физической химии, Лаборатория невалентных взаимодействий

научный руководитель – Тупикина Елена Юрьевна

В течение бакалавриата на кафедре Квантовой химии занимался квантово-химическим моделированием наносистем (нанотрубок и нанослоёв) на основе монохалькогенидов галлия в программе CRYSTAL, а также моделированием нанотрубок на основе дисульфида молибдена с помощью силовых полей в программе GULP. В лаборатории Невалентных взаимодействий занимался квантово-химическим моделированием ЯМР-параметров, а также расчётом изменения энергий Гиббса производных литийнафталина для изучения их агрегационного поведения в растворах с помощью программы Gaussian, а также расчётом механизмов нуклеофильного замещения диметиламино группы в реакции циклизации различных альдоксимов в изоксазолы.

В магистратуре планируется квантово-химическое исследование каталитического механизма антиоксидантного фермента глутатионпероксидазы при восстановлении пероксидов. В рамках этого исследования будет произведено квантово-химическое моделирование возможных каталитических механизмов фермента, а также будет изучено влияние дополнительных невалентных взаимодействий в активном центре фермента на особенности электронного строения глутатионпероксидазы.