



Игнатова Ирина Игоревна, магистр 1 курс.

Получила степень бакалавра в Санкт-Петербургском Государственном Университете. Выпускающая кафедра – кафедра квантовой химии, научный руководитель – Порсев Виталий Вениаминович.

Со второго по третий курс бакалавриата работала в лаборатории синтеза на основе электрофильной активации органических соединений под руководством профессора Александра Викторовича Васильева, где исследовала тему тандемного ионного гидрирования и гидроарилрования производных 3-арилпропиновых кислот.

С четвертого курса начала работу в научной группе «Квантовая химия наноструктур: электронные, колебательные и термодинамические свойства нанослоев, нанотрубок, нанопроводов и нанолент» Р.А. Эварестова, где моим научным руководителем стал Виталий Вениаминович Порсев, в данной группе я планирую продолжать работать в магистратуре.

Тема бакалаврской ВКР: «Квантовохимическое исследование люминесценции в сополимерах флуорена», в которой я исследовала с точки зрения квантовохимических расчетов синтезированные в ИВС РАН полупроводниковые полимеры. При выполнении ВКР проводились квантовохимические расчеты олигомерных моделей полимеров методом DFT в программе Gaussian 16, в частности: подбор необходимого обменно-корреляционного функционала, нахождение минимума на ППЭ для моделей полимеров, расчет длин волн эмиссии, подтверждение существования эксиплекса между заместителями в полимере с красным смещением длины волны люминесценции.

В магистратуре я планирую продолжать квантовохимическое исследование полупроводниковых полимеров - полифлуоренов совместно с ИВС РАН и писать по этой теме магистерскую диссертацию.