Форма № 5 (Структура научного профиля (портфолио) потенциальных научных руководителей участников Международной олимпиады Ассоциации «Глобальные университеты» по треку аспирантуры в 2020-2021 гг., утверждена протоколом результатов заочного голосования Организационного комитета Международной олимпиады Ассоциации образовательных организаций высшего образования «Глобальные университеты» для абитуриентов магистратуры от 25.06.2020 г. № 1-з)

|  |  |
| --- | --- |
| Университет | Томский государственный университет/ Kyungpook National University, Republic of Korea |
| Уровень владения английским языком | Свободный |
| Направление подготовки, на которое будет приниматься аспирант | Физика и астрономия |
| Код направления подготовки, на которое будет приниматься аспирант | 03.06.01 |
| Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство) | 2019-2021: Руководитель проекта 2019R1I1A1A01061339 National Research Foundation of Republic of Korea  2020-по н.вр.: Совместный грант NRF (Корея)-РФФИ 2019K2A9A1A06100125, исполнитель |
| Перечень возможных тем для исследования | Моделирование фотоиндуцированных процессов в комплексах (метало)органических соединений, белков, фрагментов ДНК с малыми хромофорными молекулами или кластерами. |
| Research supervisor:  Vladimir A. Pomogaev,  Candidate of Phys&Math Science, 2002, Tomsk State University, Tomsk | Заголовок: Гибридное многомасштабное компьютерное моделирование фотохимических процессов в биополимерах с захваченными фрагментами хромофора и молекулярным окружением, разработанное с использованием различных теоретических моделей |
| Научные интересы научного руководителя: электронные структуры, молекулярная фотоника и спектроскопия многоатомных молекул, различных молекулярных систем, биологических фрагментов и других наноразмерных объектов в различных аспектах, таких как проектирование, разработка и реализация математических моделей для внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий, расчет спектральных- люминесцентные и фотохимические свойства композитных биополимерных комплексов со встроенными люминесцентными зондами в растворителях и других молекулярных средах. |
| Research highlights (при наличии): |
| * Supervisor’s specific requirements: Магистратура в области теоретической молекулярной химии и спектроскопии. Навыки программирования. Квантовая механика и молекулярная динамика. |
| Supervisor’s main publications:  1. The Journal of Physical Chemistry C. Volume 124, 2020. P. 11100–11109; “Computational Investigation on Photohysical Properties of Halogenated Tetraphenyl BODIPY” by Vladimir A. Pomogaev, Sandro Chiodo, Kenneth Ruud, Rimma Kuznetsova, Pavel Avramov. DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c01742.  2. Scientific Reports. Volume 9, 2019. P. 15988; “Exciton Absorption and Luminescence in i-Motif DNA” Zakhar Reveguk, Evgeny Khoroshilov, Andrey Sharkov, Vladimir Pomogaev, Andrey Buglak, Alexander Tarnovsky, Alexei Kononov. DOI: 10.1038/s41598-019-52242-1.  3. The Journal of Physical Chemistry C. Volume 123, 2019. P. 18215-18221; “Photo-Transformation Trajectories of Nitro-Spiropyran in Hybrid Compounds with [60]Fullerene” by Vladimir A. Pomogaev, Pavel V. Avramov, Ruud Kenneth. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b04197  4. International Journal of Quantum Chemistry. Volume 119, 2019. P. e25995; “Predicting absorption spectra of silver‐ligand complexes” A.A. Buglak, V.A. Pomogaev, A.I. Kononov.  DOI: 10.1002/qua.25995  Journal of Physics and Chemistry of Solids. Volume 134, 2019. P.324-332; “The role of strong electron correlations in determination of band structure and charge distribution of transition metal dihalide monolayers” E.A. Kovaleva, Iu Melchakova, N.S. Mikhaleva, F.N. Tomilin, S.G. Ovchinnikov, Woohyeon Baek, V.A. Pomogaev, P. Avramov, A.A. Kuzubov. DOI: 10.1016/j.jpcs.2019.05.036.  5. Nano Letters. Volume 19, 2019. P. 1570-1576; “Unique Nanomechanical Properties of Diamond–Lonsdaleite Biphases: Combined Experimental and Theoretical Consideration of Popigai Impact Diamonds” by Woohyeon Baek, Sergey A. Gromilov, Artem V. Kuklin, Evgenia A. Kovaleva, Alexandr S. Fedorov, Alexander S. Sukhikh, Michael Hanfland, Vladimir A. Pomogaev, Iuliia A. Melchakova, Paul V. Avramov, and Kirill V. Yusenko. DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b04421.  6. Journal of Molecular Liquids. Volume 278, 2019. P. 5-11; “Photonics of boron(III) and zinc(II) dipyrromethenates as active media for modern optical devices” by R.T. Kuznetsova, Iu.V. Aksenova, A.A. Prokopenko, V.A. Pomogaev, E.V. Antina, M.B. Berezin, L.A. Antina, N.A. Bumagina. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.01.049.  7. The Journal of Physical Chemistry C. Volume 122, 2018. P. 29549-29558; “Fluorescent Silver Clusters on Protein Templates: Understanding Their Structure” by Tomash S. Sych, Zakhar V. Reveguk, Vladimir A. Pomogaev, Andrey A. Buglak, Anastasiya A. Reveguk, Ruslan R. Ramazanov, Nikolay M. Romanov, Elena V. Chikhirzhina, Alexander M. Polyanichko, and Alexei I. Kononov. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b08306.  8. The Journal of Physical Chemistry C. Volume 122, 2018. P. 26275-26280; “Which Amino Acids are Capable of Nucleating Fluorescent Silver Clusters in Proteins?” by Tomash S. Sych, Andrey A. Buglak, Zakhar V. Reveguk, Vladimir A. Pomogaev, Ruslan R. Ramazanov, and Alexei I. Kononov. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b08979.  9. The Journal of Physical Chemistry A. Volume 122, 2018. P. 505-515; “Inheritance of Photochromic Properties of Nitro-Substituted and Halogenated Spiropyrans Containing the Pyrrolidino[60]fullerene” by Vladimir Pomogaev, Valery A. Barachevsky, Airat R. Tuktarov, Pavel V. Avramov and Victor Ya. Artyukhov. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b08374.  10. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. Volume 354, 2018. P. 147-154; “Photonics of coordination complexes of dipyrrins with p- and d-block elements for application in optical devices” by Rimma T. Kuznetsova, Iuliia V. Aksenova, Danil E. Bashkirtsev, Aleksandr A. Prokopenko, Vladimir A. Pomogaev, Elena V. Antina, Mikhail B. Berezin, Natalia A. Bumagina. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2017.08.068.  11. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. Volume 354, 2018. P. 86-100; “Insight into the fluorescence quenching of Trp214 at HSA by the Dimetridazole ligand from simulation” by Vladimir A. Pomogaev, Ruslan R. Ramazanov, Kenneth Ruud, Victor Ya. Artyukhov. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2017.08.041.  12. Chemical Physics Letters. Volume 673, 2017. P. 11–18; “Excitation spectra of Ag3–DNA bases complexes: A benchmark study” by D.A. Maksimov, V.A. Pomogaev, A.I. Kononov. DOI: 10.1016/j.cplett.2017.01.074  13. Computational Materials Science. Volume 125, 2016. P. 168-175; “Potential energy surfaces of mechanically induced reconstruction and doping of carbon sp2 lattice” by Vladimir A. Pomogaev and Pavel V. Avramov. DOI: 10.1007/s11182-016-0802-z  14. Inorganic Chemistry. Volume 54, 2015. P. 8288−8297; “Luminescence Solvato- and Vapochromism of Alkynyl-Phosphine Copper Clusters” by Ilya S. Krytchankou, Igor O. Koshevoy, Vladislav V. Gurzhiy, Vladimir A. Pomogaev, and Sergey P. Tunik. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b00239.  15. International Journal of Quantum Chemistry. Volume 115, 2015. P. 239-244; “Structure and Electronic Properties of Hollow-Caged C60 Fullerene-Derived (MN4)nC6(10-n) (M = Zn, Mg, Fe, n = 1-6) Complexes” by Vladimir A. Pomogaev, Pavel V. Avramov, Alex A. Kuzubov, and Victor Ya. Artyukhov. DOI 10.1002/qua.24840.  16. Journal of Porphyrins and Phthalocyanines. Volume 18, 2014. P. 552-568; “Atomic structure and physical properties of fused porphyrin nanoclusters” by Pavel V. Avramov, Alex A. Kuzubovb, Seiji Sakai, Manabu Ohtomo, Shiro Entani, Yoshihiro Matsumoto, Natalia S. Eleseeva, Vladimir A. Pomogaev and Hiroshi Naramoto.  17. Physical Chemistry Chemical Physics. Volume 15 (38), 2013. P. 15954-15963; “Development and Application of Effective Pairwise Potentials for UO2n+, NpO2n+, PuO2n+, and AmO2n+ (n = 1;2) Ions with Water” by Vladimir Pomogaev, Surya Prakash Tiwari, Neeraj Rai, George Goff, Wolfgang Runde, William F. Schneider, and Edward J. Maginn.  18. Theoretical Chemistry Accounts. Volume 130, 2011. P. 609-632; “Thermo-dynamical contours of electronic-vibrational spectra simulated using the statistical quantum–mechanical methods” by Vladimir Pomogaev, Anna Pomogaeva, Pavel Avramov, Karl J. Jalkanen and Sergey Kachin. |
|  | Results of intellectual: Design and testing of promising photo-biopolymer materials. |