



ПОДСЕКЦИЯ «Квантовая химия и строение молекул»

ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

Регламент: устные доклады – до 8 мин, ответы на вопросы – до 4 мин.

16 апреля, четверг химический факультет МГУ, ауд. преп. СХА Студенты Ведущий: в.н.с., к.ф.-м.н. Глебов Илья Олегович	
15:00–15:04	Открытие подсекции в.н.с., к.ф.-м.н. Глебов Илья Олегович
15:05–15:17	Неограниченный метод полного конфигурационного взаимодействия: анализ среднего значения оператора $\hat{S}^2$ Демченко Максим Алексеевич, студент, 3 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
15:18–15:30	Моделирование сольватохромных эффектов в 9,9'-биантриле и родственных соединениях Носач Егор Александрович, студент, 6 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия
15:31–15:43	Влияние колебательного возбуждения на конкуренцию каналов релаксации в неадиабатической динамике катиона метанимина Попов Дмитрий Сергеевич, студент, 6 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
15:44–15:56	Молекулярное моделирование связывания β-аррестина 1 с метаботропным глутаматным рецептором 3 Леонова Микаэлла Сергеевна, студент, 6 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
15:57–16:09	Моделирование кривых потенциальной энергии электронных состояний молекулы RaF, участвующих в процессе лазерного охлаждения Шашков Артём Владиславович, студент, 4 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
16:10–16:22	Квантово-химическое моделирование электроновозбужденных состояний 2,2'- и 4,4'-бипиридина Солдатенков Тимофей Алексеевич, студент, 6 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, факультет фундаментальной физико-химической инженерии, Москва, Россия





16:23–16:35	Корректный учет влияния низких частот в газофазной термодинамике микросольватированных кластеров ионов щелочных металлов Розов Тимофей Павлович, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
16:36–16:48	Неадиабатическая динамика протонированного основания Шиффа ретиналя с использованием нейросетевых потенциалов Радзиковицкий Павел Михайлович, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
16:49–17:01	Моделирование фотохимических процессов в As_2S_3 при облучении светом ИК- и УФ-диапазонов Смирнов Сергей Артёмович, студент, 4 курс бакалавриата <i>МФТИ, Физтех, Долгопрудный, Россия</i>

17 апреля, пятница

химический факультет МГУ, ауд. преп. СХА

Студенты и аспиранты

Ведущий: в.н.с., к.ф.-м.н. Глебов Илья Олегович

13:30–13:42	DFT моделирование механизмов реакции молекулы H_2 с магниевыми кластерами, допированными субнаноразмерными частицами серии $Ti_4-Ti_3Ni-Ti_2-Ni_2-TiNi_3-Ni_4$ Баранникова Анна Сергеевна, студент, 2 курс магистратуры <i>Южный Федеральный университет, химический факультет, Ростов-на-Дону, Россия</i>
13:43–13:55	Висмутофильные взаимодействия в димерах гомолептических дитиокарбаматов висмута(III) Субботина Мария Романовна, студент, 3 курс бакалавриата <i>СПбГУ, Институт Химии, Санкт-Петербург, Россия</i>
13:56–14:08	Развитие подходов к стабилизации анионного вакуумного состояния в методе связанных кластеров Кожевников Иван Геннадьевич, студент, 2 курса магистратуры <i>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, Россия</i>
14:09–14:21	Роль магнито-дипольных переходов в формировании магнитно-индуцированных токов в первом возбужденном синглетном состоянии (S_1) циклических π-сопряженных систем Валиулина Ленара Ильмировна, аспирант 4 г.о. <i>Томский государственный университет, физический факультет, Томск, Россия</i>
14:22–14:34	Неэмпирические эффективные операторы дипольного момента полос поглощения асимметричных волчков Добролюбов Егор Олегович, аспирант 4 г.о. <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





14:35–14:47	Исследование возможностей методов Mixed-Reference Spin-Flip TD-DFT и ΔSCF для описания безызлучательного распада состояния S_1 анионной формы 3',5'-дифтор-4-гидроксibenзилиден-имидозалинона Одинцов Константин Викторович, аспирант 3 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
14:48–15:00	Моделирование адиабатических и неадиабатических эффектов в триплетных состояниях H_2 с помощью прецизионных функций квантового дефекта Лихарев Алексей Сергеевич, аспирант 2 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
15:01–15:13	Моделирование низколежащих электронных состояний молекулы CaO методом многоконфигурационной теории возмущений CDAS-PT2 Акимов Георгий Александрович, аспирант 2 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
15:14–15:26	Первопринципное предсказание атомных структур, термодинамической устойчивости и энергетических характеристик бор-кислородной кластерной системы Федяева Мария Александровна, аспирант 1 г.о. Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
15:27–15:45	Перерыв
15:46–15:58	Сравнительный анализ взаимодействий галоген...галоген в анион-анионных и нейтральных системах Мещеряков Николай Вадимович, аспирант 3 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
15:59–16:11	Поуровневые константы скорости реакции $F+H_2=H+HF$ с участием неравновесных состояний молекулярного водорода Паханьян Игорь Михайлович, аспирант 2 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
16:12–16:24	Разработка и реализация алгоритмов расчета неадиабатических матричных элементов и аналитического градиента многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений Бруякин Юрий Владимирович, аспирант 1 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
16:25–16:37	Идентификация и моделирование колебательно-вращательной структуры полос ν_4 и $2\nu_6$ в спектре высокого разрешения молекулы дифторхлорметана ($^{12}CH^{35}ClF_2$) Ефремов Илья Манович, аспирант 4 г.о. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
16:38–16:50	Реализация метода конфигурационного взаимодействия с однократными возбуждениями в приближении разложения единичного оператора Жуков Максим Дмитриевич, студент, 5 курс специалитета Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,





	<i>химический факультет, Москва, Россия</i>
16:51-17:09	Перерыв
17:10-17:15	Подведение итогов. Награждение авторов лучших устных докладов. в.н.с., к.ф.-м.н. Глебов Илья Олегович

22 апреля, среда
химический факультет МГУ, холл 2 этажа

12:30-14:45	Стендовая сессия
15:25-15:30	Подведение итогов. Награждение авторов лучших стендовых докладов. Закрытие подсекции. в.н.с., к.ф.-м.н. Глебов Илья Олегович