



Программа школы-конференции

Современные проблемы химической физики
и теоретической химии

25 июля – 29 июля 2022 г.
Большие Коты

25 июля

10:45 – 12:15	<i>Теплоход Иркутск – Большие Коты</i>		
12:30 – 14:00	<i>Регистрация, расселение участников</i>		
14:00	<i>Обед</i>		
16:00	Открытие конференции. Приветственное слово ректора ИГУ, д-ра хим. наук А.Ф. Шмидта		
16:20	Витковская Надежда Моисеевна, <i>д-р хим. наук</i>	ИГУ	Развитие квантовой химии в Иркутском государственном университете
17:00	Титов Анатолий Владимирович, <i>д-р физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Развитие средств релятивистского моделирования молекул и материалов с d- и f- элементами в лаборатории квантовой химии НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
18:00	<i>Приветственный ужин</i>		

26 июля

8:00	<i>Завтрак</i>		
Первая сессия			
9:00	Каманина Наталия Владимировна, <i>д-р физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Варьирование показателя преломления, как основной индикатор изменения базовых свойств органических материалов
9:50	Тойка Андрей Сергеевич	ПИЯФ	Система ИТО-углеродные нанотрубки для целей фотофизики
10:05	Барнаш Ярослав Валерьевич	ПИЯФ	Система полиимид-фуллерен для целей оптоэлектроники
10:20	Суюсова Марина Вадимовна, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Перспективы применения водорастворимых производных эндодральных металлофуллеренов и их прекурсоров
10:40	<i>Кофе-брейк</i>		
11:00	Лютова Жанна Борисовна, <i>канд. хим. наук</i>	ПИЯФ	Радиационно-инициированные эффекты в фуллеренах
11:20	Титова Анна Владимировна	ПИЯФ	Структурные особенности и свойства водорастворимых производных экзо и эндокомплексов фуллеренов

11:35	Рябокоть Ирина Сергеевна	ПИЯФ	Исследование возможности получения эндокомплексов фуллеренов с изотопами йода
11:50	Мосягин Николай Сергеевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Метод обобщенного релятивистского эффективного потенциала остова
12:10	Ломачук Юрий Вячеславович, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Электронная структура и свойства атомов в соединении: расчеты методом погруженного в кристалл кластера кристаллов ксенотима YPO_4 и $CaNb_2O_6$
12:20	Шахова Вера Михайловна	ПИЯФ	Прецизионное моделирование электронной плотности в периодических структурах с иттербием
13:00	Обед		
Вторая сессия			
14:00	Трофимов Александр Борисович, <i>д-р хим. наук</i>	ИГУ	Метод ADC: основные этапы развития и современное состояние
14:40	Громов Евгений Владимирович, <i>канд. хим. наук</i>	ИГУ	Механизм фотохимической настройки хромофора фотоактивного желтого белка
15:05	Скитневская Анна Дмитриевна, <i>канд. хим. наук</i>	ИГУ	Релаксация состояний с внутривалентными вакансиями в биологически значимых молекулах: роль донорно-акцепторных взаимодействий
15:25	Кофе-брейк		
15:45	Андреев Олег Юрьевич, <i>д-р физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Исследование автоионизационных состояний в процессах столкновения электронов с многозарядными ионами
16:10	Соловьев Дмитрий Анатолевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	СПбГУ	Thermal QED effects in atoms
16:35	Александров Иван Александрович, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	СПбГУ	Механизм Швингера и другие нелинейные эффекты КЭД в сильных полях

16:55	Лященко Константин Николаевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	СПбГУ	Двухфотонная диэлектронная рекомбинация в многозарядных ионах
17:15	Князева Виктория Александровна	СПбГУ	Двухфотонные переходы в одноэлектронных и мюонных ионах
17:30	Мандрыкина Зоя Андреевна	СПбГУ	Двухфотонная аннигиляция позитронов с электронами К-оболочки водородоподобных ионов
18:00	Ужин		

27 июля

8:00	Завтрак		
Первая сессия			
9:00	Петров Александр Николаевич, <i>д-р физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Поиск новой физики на молекулах
9:40	Чубуков Дмитрий Валерьевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	T, P-нечётное взаимодействие электрона с ядром посредством обмена бозоном Хиггса
10:00	Захарова Анна Вадимовна	ПИЯФ	P, T-нечетные эффекты в многоатомных молекулах
10:15	Аникин Алексей Андреевич	СПбГУ	Nonresonant effects in precision atomic spectroscopy
10:30	Батаев Вадим Альбертович, <i>канд. хим. наук</i>	МГУ	Сложный характер молекулярных колебаний как источник ошибок в колебательной спектроскопии
10:50	Кофе-брейк		
11:10	Кобычев Владимир Борисович, <i>д-р хим. наук</i>	ИГУ	Квантовохимические исследования механизмов реакций ацетилена в суперосновных средах на основе диметилсульфоксида
11:50	Орел Владимир Борисович, <i>канд. хим. наук</i>	ИГУ	Квантовохимическое исследование явления суперосновности на примере систем KOH(KO ^t Bu)/DMSO
12:15	Орлюк Юлия Алексеевна	ИГУ	Квантовохимическое моделирование реакции изопрпенилирования метанола в суперосновных средах KOH/DMSO и KOH/NMP

12:30	Абсалямов Дамир Зайнуллович	ИГУ	Механизм образования 3,5-бис(галоанилин)- 3-метилпентан-2-она из гало-ариламинов и ацетилена в суперосновной среде KOH/DMSO: квантовохимическое исследование
12:45	Манжуева Анастасия Анатолевна	ИГУ	Квантовохимическое моделирование катализируемых супероснованием KOH/DMSO реакций циклогексана с фенилацетиленом
13:00	Обед		
18:00	Ужин		

28 июля

8:00	Завтрак		
Первая сессия			
9:00	Игнатов Станислав Константинович, <i>д-р хим. наук</i>	ННГУ	Глобальная оптимизация структуры и необычные электронные свойства субнаноразмерных кластеров магния
9:40	Боченкова Анастасия Владимировна, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	МГУ	Механизмы сверхбыстрых фотохимических реакций
10:05	Фирсов Денис Аркадьевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	МГУ	ENIAD: База данных интермедиатов реакций ферментативного катализа
10:25	Бормотова Екатерина Александровна, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	МГУ	Определение неравновесной температуры лазерно-индуцированной плазмы низкого давления на основании распределения интенсивностей в колебательно-вращательной структуре "инфракрасной" системы молекулы оксида кальция
10:45	Лившиц Григорий Дмитриевич	ННГУ	Структура и энергия адсорбции хиральных лигандов на кластерах платины
11:00	Кофе-брейк		
11:20	Олейниченко Александр Витальевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	ПИЯФ	Программный комплекс EXP-T: пакет инструментов для прецизионного моделирования электронной структуры атомов и молекул релятивистским методом связанных кластеров

11:45	Зайцев Владимир Алексеевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	СПбГУ	Вычисление энергии основного состояния атома московия с помощью квантовых алгоритмов
12:05	Кожедуб Юрий Сергеевич, <i>канд. физ.-мат. наук</i>	СПбГУ	Расчеты химических свойств молекул со сверхтяжелыми элементами методом связанных кластеров
12:25	Просняк Сергей Дмитриевич	ПИЯФ	Расчёт изотопического сдвига в нейтральных атомах
12:40	Кайгородов Михаил Юрьевич	СПбГУ	Электронная структура сверхтяжелых элементов
13:00	Обед		
Вторая сессия			
14:00	Зубарев Андрей Анатольевич	ИГУ	Квантовохимическое исследование механизма образования 1-азадиенов из фенилацетилена и (<i>E</i>)- <i>N</i> -бензилиденанилина в суперосновной среде KO ^t Bu/DMSO
14:15	Прадедова Анастасия Георгиевна	ИГУ	Квантовохимическое моделирование стереоселективного образования (<i>E,Z</i>)-азадиена в суперосновной среде KOBu ^t /DMCO
14:30	Гнатовский Григорий Русланович	ИГУ	Сравнительное квантовохимическое исследование путей сборки 1-формил-2-пиразолина из ненасыщенных кетонов, гидразина и муравьиной кислоты
14:45	Тепляшин Никита Владимирович	ИГУ	Исследование механизма образования <i>N</i> -амино-2-тио-1 <i>H</i> -пиррола и его <i>S</i> -винилирования в среде KOH/N ₂ H ₄ ·H ₂ O методами квантовой химии
15:00	Кофе-брейк		
15:20	Закрытие, подведение итогов		
18:00	Ужин		

29 июля

8:00	Завтрак
	<i>Сборы, свободное время</i>
12:00	Обед
13:30	Теплоход Большие Коты – Иркутск

Лист для заметок