

Программа заседаний подсекции “Квантовая химия”

Регламент устных докладов - до 10 мин, ответы на вопросы - до 5 мин.

Показ иллюстративного материала - мультимедийный проектор (файлы ppt, pdf)

Правила оформления стендов – размер стенда А1, ориентация вертикальная.

11 апреля, среда, ауд. 446	
Председатель: д.ф.-м.н., проф. Бучаченко А.А.	
9.45-10.00	Открытие устной сессии подсекции “Квантовая химия”
10.00-10.15	Поддубный Владимир Владимирович МГУ, химический факультет Применимость теории Редфилда для описания процесса первичного переноса электрона в реакционных центрах пурпурных бактерий <i>Rh. Sphaeroides</i>
10.15-10.30	Титов Олег Игоревич МГУ, химический факультет Роль связевых функций в описании ван-дер-ваальсовых систем на примере комплекса CF_4 и H_2CO
10.30-10.45	Майоров Алексей Институт Биохимической Физики РАН Квантово-химическое исследование механизма озонлиза галогенсодержащих производных этилена и ацетилен
10.45-11.00	Ческидов Александр Викторович МГУ, химический факультет Неэмпирическое описание комплексов $Me(C_2H_4)$ ($Me=Ni, Pd, Pt$)
11.00-11.15	Мухамедзянова Дина Фиркатьевна МГУ, химический факультет Особенности взаимодействия золото-носитель на оксидной и углеродной поверхности в каталитических системах
11.15-11.30	Скворцов Иван Алексеевич МГУ, химический факультет Квантово-химическая релятивистская модель молекулы PdPt
11.30-11.45	Перерыв
11.45-12.00	Сунцова Марина Александровна МГУ, химический факультет Характеристика новых азотсодержащих высокоэнергетических соединений на основе квантово-химических расчетов
12.00-12.15	Озеров Георгий Константинович МГУ, химический факультет Исследование реакции околопороговой ассоциативной ионизации при столкновениях атомов в высоковозбуждённых состояниях
12.15-12.30	Мальков Сергей Московский Педагогический Государственный Университет Расчет свойств молекул кислородсодержащих соединений плутония при помощи прецизионной модели релятивистских псевдопотенциалов.
12.30-12.45	Корчагина Ксения Андреевна МГУ, химический факультет Молекулярно-механический подход в вычислении матричного колебательного сдвига димера марганца
12.45-13.00	Алексеев Евгений Сергеевич МГУ, химический факультет Выбор потенциальной функции для описания межмолекулярных взаимодействий в жидком метаноле
13.00-13.15	Голубев Николай Валерьевич МГУ, химический факультет Термодинамическое описание процесса сорбции методом молекулярной динамики
13.15-13.30	Перерыв
13.30-13.45	Трифонов Николай Юрьевич Институт проблем химической физики РАН Модель интеркаляции фуллерита C_{60} примесными молекулами

13.45-14.00	Елисеева Наталья Сергеевна <i>Сибирский федеральный университет</i> Теоретическое изучение влияния числа слоев на свойства тонких пленок SiC
14.00-14.15	Лукманов Тимур Ильгизович <i>Башкирский государственный университет</i> Влияние учета растворителя на относительную стабильность анионных форм урацила и его производных
14.15-14.30	Яшин Вячеслав Анатольевич <i>Дальневосточный Федеральный Университет</i> Исследование электронной структуры октасилсесквиоксанов (SiO _{1,5} R) ₈ , где R=H, C ₂ H ₃ , C ₆ H ₅

10 апреля, вторник, холл второго этажа Химического факультета МГУ, 13.00-14.30		
Стендовая сессия подсекции «Квантовая химия» 13.00-15.00		
1	Жабанов Юрий Александрович	Структура и энергетика триадиазолсодержащего порфириноида с увеличенной координационной полостью <i>Ивановский государственный химико-технологический университет</i>
2	Никитенко Наталья Геннадьевна	Влияние факторов среды на энергетический профиль реакции активации метана комплексами золота с биофлавоноидами в мягких условиях: квантово-химический расчет <i>Институт проблем химической физики РАН</i>
3	Кроик Роман Владимирович	Строение 3,5-ди- <i>трет</i> -бутил-1,2-бензохинона и его замещённых производных: квантовохимическое исследование. <i>НИИ химии Нижегородского государственного университета</i>
4	Семенов Павел Евгеньевич	Оптимизация геометрии кластеров гексагидрокси- и гексагидропероксостаннат-ионов <i>Московский педагогический государственный университет</i>
5	Михайлов Иван Викторович	Моделирование несимметричных дендримеров методом броуновской динамики <i>Тверской государственный университет,</i>
6	Медведева Юлия Сергеевна	Экспериментальное и теоретическое изучение строения бензолсульфокислоты и ее замещенных <i>Ивановский государственный университет</i>
7	Марочкин Илья Иванович	Влияние заместителей на энергию амидной связи: квантово-химическое изучение <i>химический факультет МГУ</i>
8	Федоров Михаил Сергеевич	Конформационные свойства метилового эфира <i>орто</i> -нитробензолсульфокислоты <i>Ивановский государственный университет</i>
9	Сныга Юлия Геннадьевна	Квантово-химическое исследование активации кислорода на кластерах Ag ₈ и Ag ₂₀ <i>МГУ, химический факультет</i>
10	Мамин Эльдар Алиевич	Влияние деформации двойной вязи на скорость реакции озона с монохлорэтиленом и дихлорэтиленом <i>Институт проблем химической физики РАН</i>
11	Купова Ольга Юрьевна	Квантовохимическое изучение особенностей присоединения димеров формальдегида к алкенам <i>Башкирский Государственный университет</i>

