



25 июня в конференц-зале Иркутского института химии им. А.Е. Фаворского СО РАН состоится семинар **"Релятивистские и многоэлектронные эффекты в современном квантовохимическом моделировании"**.

Участвуют представители

- Иркутского института химии им. А.Е. Фаворского СО РАН (Иркутск)
- Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (Москва)
- Иркутского государственного университета (Иркутск)
- Санкт-Петербургского государственного университета (Санкт-Петербург)
- Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова (Санкт-Петербург)
- Иркутского национального исследовательского технического университета (Иркутск)
- Института геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН (Иркутск)

Оргкомитет семинара

д.х.н., профессор Л.Б. Кривдин (и.о. директора ИрИХ СО РАН)

д.х.н., профессор Н.М. Витковская (зав. лаб. ИГУ)

д.х.н., профессор В.Б. Кобычев (профессор хим. фак. ИГУ)

д.х.н. А.Б. Трофимов (с.н.с. ИГУ, с.н.с. ИрИХ СО РАН)

E-Mail: vita@cc.isu.ru

Тел.: (3952) 52 12 11

Программа семинара

9⁰⁰ д.х.н., профессор Л.Б. Кривдин (и.о. директора ИрИХ СО РАН)
"Квантовохимические расчеты спектроскопических параметров ЯМР с учетом релятивистских поправок".

9⁵⁰ д.ф.-м.н., профессор А.В. Титов (зав. лаб. ПИЯФ),
Ю.В. Ломачук (м.н.с. ПИЯФ)
"Методы и цели исследования соединений тяжелых атомов в лаборатории квантовой химии ПИЯФ. Химическая идентификация новых долгоживущих сверхтяжелых элементов седьмого периода: эксперименты и расчеты".

10⁴⁰ д.х.н. А.Б. Трофимов (с.н.с. ИГУ, с.н.с. ИрИХ СО РАН)
"Пропагаторные методы в приближении алгебраического диаграммного построения: дальнейшее развитие теории и приложения".

11³⁰ – 12⁰⁰ Перерыв

12⁰⁰ д.ф.-м.н. А.В. Зайцевский (рук. гр. ПИЯФ, г.н.с. МГУ),
д.ф.-м.н., профессор А.В. Титов (зав. лаб. ПИЯФ)

"Химическая связь в кислородных соединениях актинидов: качественная картина".

12⁵⁰ к.ф.-м.н. А.С. Мысовский (нач. отд., ИрНИТУ, с.н.с. ИГХ СО РАН)

"Расчеты электронной и пространственной структуры неупорядоченных твердых тел и наноразмерных структур".

13⁴⁰ – 14³⁰ Перерыв на обед

14³⁰ к.ф.-м.н. Л.В. Скрипников (н.с. ПИЯФ, доцент СПбГУ),
А.Д. Кудашов (аспирант СПбГУ)

"Расчеты двухатомных молекул для высокоточных физических экспериментов".

14⁵⁵ к.х.н. А.Н. Петров (с.н.с. ПИЯФ, доцент СПбГУ)

"Псевдопотенциалы остовов тяжелых элементов – универсальный инструмент расчета свойств соединений тяжелых элементов".

15²⁰ А.М. Белоголова (студентка ИГУ),

д.х.н. А.Б. Трофимов (с.н.с. ИГУ, с.н.с. ИрИХ СО РАН)

"Метод CAP/ADC для изучения метастабильных анионных состояний молекул".

15⁴⁵ к.ф.-м.н. А.С. Мысовский (нач. отд., ИрНИТУ, с.н.с. ИГХ СО РАН)

"Спектральное представление обменного оператора Хартри-Фока".

16¹⁰ – 16³⁰ Перерыв

16³⁰ к.х.н. А.Н. Петров (с.н.с. ПИЯФ, доцент СПбГУ)

"Исследование сверхтонкой структуры, эффектов Штарка и Зеемана в двухатомных молекулах".