**Программа международной летней научной школы “ Современные методы квантовой химии в приложениях” (International Summer School “Modern Quantum Chemistry Methods in Applications”)**

Международная летняя научная школа “Современные методы квантовой химии в приложениях” (International Summer School “Modern Quantum Chemistry Methods in Applications”) проходит с 19 июля по 18 августа 2017 г. на базе Самарского национального исследовательского университета им С.П. Королева. В работе школы принимают участие более 50 студентов, аспирантов, научных работников и профессорско-преподавательских работников из России и зарубежья.

Цель научной школы - овладение молодыми исследователями и специалистами современными подходами в изучении структур и свойств молекулярных систем методами физической и квантовой химии в ходе решения конкретных актуальных задач под руководством ведущих отечественных и зарубежных ученых.

Программа школы включает следующие разделы: комбинированные квантово-механическиеметоды в прогнозировании структур и свойств квантовых объектов; механизмы химических и энергообменных процессов.

Актуальность темы обусловлена тем, что при проектировании эффективных энергетических, лазерных, плазменных и других установок необходимы инструментарии для прогнозирования физико-химических свойств атомов и молекул. Химические и энергообменные процессы в энергетических установках сложны и обычно включают множество элементарных реакций с вовлечением активных частиц (радикалы, промежуточные комплексы, возбужденные атомы и молекулы). Кинетические константы для большинства из процессов с активными частицами, как правило, недоступны. Для получения точных сведений о их структуре используются сложные экспериментальные установки с высокими временным разрешением и чувствительностью, а также современные методы квантовой химии.

Из всего многообразия процессов с участием активных частиц особое внимание уделяют тем из них, которые протекают в зонах горения энергетических установок, в атмосфере и в активных средах газовых лазеров. Их выбор для исследования связан, с одной стороны, с их определяющей ролью во многих процессах и, с другой стороны, недостатком кинетических данных по этим слабоизученным процессам.

В работе школы будут осваиваться методы исследований элементарных энергообменных и химических процессов с использованием импульсной лазерной техники. Современными методами квантовой химии будут изучаться механизмы образования и окисления полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) в зонах горения, а также находиться кинетические константы процессов с участием активных форм кислорода.

В работе научной школы задействованы экспериментальные установки Самарского университета, вычислительные ресурсы Международного университета Флориды (Майами, США), Университета Эмори (Атланта, США), Гавайского университета (Гонолулу, США). В работе школы принимают участие ведущие зарубежные ученые, среди них: М. Хэвен (Michael Heaven, Emory University, Atlanta, USA, h=34), А. Мебель (Alexander Mebel, International Florida University, Miami, USA, h=43), Р. Кайзер (Ralf Kaiser, University of Hawai'I at Manoa, Honolulu, USA, h=44).

**ПРОГРАММА**

**Секция 1. Экспериментальные методы физической химии**

***Председатель секции: Азязов В.Н.***

В секции будут рассмотрены экспериментальные методы исследований, широко применяемых для изучения структур атомов, молекул, промежуточных состояний, радикалов, наночастиц, а также кинетики химических и энергообменных процессов с участием данных соединений. В секции со своими докладами выступят ведущие ученые из-зарубежа:

- М. Хэвен (Michael Heaven, Emory University, Atlanta, USA) “Spectroscopic studies of the alkaline earth oxides and hyper metallic oxides: The quest for ultra-cold molecular ions” (“Спектроскопические исследования щелочно-земельных оксидов и гипер-металлических оксидов: поиск ультра-холодных молекулярных ионов”);

- Р. Кайзер (Ralf Kaiser, University of Hawai'i at Manoa, Honolulu, USA) “Photoionization as a Universal Tool to Unravel the Synthesis of Complex Organic Molecules in the Interstellar Medium” (“Фотоионизация как универсальный инструмент для понимания синтеза сложных органических молекул в межзвездной среде”).

Методы физической химии будут осваиваться в ходе проведения экспериментов на установках расположенных в лабораториях Самарского университета, оборудованных импульсными лазерными системами под руководством ведущих ученых.

**Секция 2. Современные методы квантовой химии в приложениях**

***Председатель секции: МебельА.М.***

Слушатели школы будут осваивать современные методы квантовой химии в ходе решения конкретных научных задач под руководством ведущих ученых. Будут изучаться структуры молекул, промежуточных и переходных состояний участвующих в процессах горения углеводородов, в плазме электрического разряда и в активных средах газовых лазеров с использованием математических пакетов “Gaussian” и “MOLPRO”. В работу секции будут вовлечены вычислительные ресурсы Международного университета Флориды (Майами, США), Университета Эмори (Атланта, США), межвузовского научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению и Самарского университета. Особое внимание будет уделено слабоизученным процессам формирования и разрушения полициклических углеводородов в пламенях. Часть участников школы будет изучать элементарные процессы с участием активных форм кислорода: колебательно-возбужденная молекула озона, электронно-возбужденный молекулярный один дельта кислород и атом кислорода. В этой секции также будут рассматриваться химические и энергообменные процессы с участием возбужденных частиц.

**Организационный комитет**

А.М. Мебель (председатель) Научный руководитель НИЛ-101,Самарский

университет

И.П. Завершинский (зам.председателя) И.о. директора естественнонаучного института,

заведующий кафедрой физики, Самарский

университет

М.Ч. Хэвен Ведущий учёный, профессор, Университет Эмори

Р.И. Кайзер Ведущий учёный, профессор, Гавайский

Университет

В.Н. Азязов Ведущий научный сотрудник НИЛ-101,

Самарский университет

М.В. Загидуллин Ведущий научный сотрудник НИЛ-101,

Самарский университет

Д.П.Порфирьев (секретарь орг.комитета) Старший научный сотрудник НИЛ-101,

Самарский университет

**Программный комитет**

И.П. Завершинский (председатель) НИЛ-101,Самарский университет,г. Самара

А.М. Майорова (учёный секретарь) СФ ФИАН, г. Самара

В.Н. Азязов (зам. председателя) НИЛ-101, Самарский университет,г. Самара

М.В. Загидуллин СФ ФИАН, г. Самара

Р. Кайзер (R. Kaiser) UniversityofHawai'iatManoa, Honolulu, USA

С.Г. Матвеев НИЛ-101, Самарский университет,г. Самара

А.М. Мебель (A.M. Mebel) InternationalFloridaUniversity, Miami, USA

И.А. Платонов НОЦ-218, Самарский университет,г. Самара

В.А. Салеев НОЦ-403,Самарский университет,г. Самара

А.В. Столяров МГУ, г. Москва

М. Хэвен (М. Heaven) Emory University, Atlanta, USA

А.И. Чичинин ИХКГ СО РАН, г. Новосибирск