

17 февраля 2015 года в 16.00

**в ауд. 209 РЦ Оптические и лазерные методы исследования вещества,
расположенного по адресу ул. Ульяновская 5, состоится семинар,
организованный кафедрой Лазерной химии и Лазерного
Материаловедения Института Химии и РЦ Оптические и лазерные
методы исследования вещества**

«Экспериментальная и вычислительная фемтохимия»

Приглашаются все желающие!

Понимание механизмов фотохимических реакций является важной научной задачей. Развитие современных экспериментальных методов исследования позволяет изучать динамику сверхбыстрых процессов, детектировать короткоживущие интермедиаты, которые являются непосредственными участниками любой фотохимической реакции, моделировать поверхность потенциальной энергии (изучать топологию поверхностей потенциальной энергии). В свою очередь, использование расчетных методов квантовой химии может существенно помочь интерпретации экспериментальных данных, описанию свойств участников реакции, пониманию структуры возбужденных состояний и моделированию возможных реакционных путей. Такой комбинационный подход, представляющий собой симбиоз теории и эксперимента, приводит к более глубокому пониманию фотохимии того или иного соединения, а так же создает возможность дизайна новых и контроля уже известных фотохимических реакций. В рамках семинара планируется два доклада.

«Роль растворителя в химических реакциях».

Мереценко Андрей Сергеевич, PhD, кафедра лазерной химии и лазерного материаловедения, Институт Химии, СПбГУ.

Растворитель является одним из ключевых компонентов химических реакций и физико-химических процессов в растворе. Он является и участником реакции и средой, в которой она протекает. В данном сообщении влияние растворителя на динамику и механизм химических реакций проанализировано с использованием таких современных методов исследования как лазерная спектроскопия с временным разрешением и квантово-химические расчеты. Рассмотрено влияние растворителя на выход продуктов, селективность реакции, на физико-химические процессы, связанные с переносом энергии.

«Вычислительная фотохимия».

Панов Максим Сергеевич, PhD, кафедра лазерной химии и лазерного материаловедения, Институт Химии, СПбГУ.

Доклад посвящен обсуждению вычислительных стратегий и их практического применения для изучения механизмов фотохимических реакций. На примере ряда органических соединений будут рассмотрены методы, позволяющие на молекулярном уровне моделировать процессы разрыва-образования связи с помощью детального исследования поверхности потенциальной энергии возбужденного и основного состояний.