



Заклучителна конференция по проект „МАДАРА”:

ИЗЧИСЛИТЕЛЕН КОМПЛЕКС ЗА АВАНГАРДНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ ПО МОЛЕКУЛЕН ДИЗАЙН, НОВИ МАТЕРИАЛИ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

<http://madara.orgchm.bas.bg>

20-21 октомври 2011

Национален музей „Земята и хората” - София

СОФИЯ, БЪЛГАРИЯ

ПРОГРАМА

20 октомври		
8:30-9:00	Регистрация	
9:00-9:15	Откриване на конференцията и водещ заседанието - проф. д-р Аля Таджер СУ „Климент Охридски”	
9:15-10:00	Пленарен доклад: Електрофилно ароматно заместване: коректни ли са традиционните S_EAr механизми?	проф. дн Борис Гълъбов СУ „Климент Охридски”
10:00-10:20	Квантово химично изследване на структурата и спектроскопските свойства на циркониеви зол-гел материали	доцент д-р Ивелина Георгиева ИОНХ– БАН
10:20-10:40	Групиране с компресия на стъпала върху визинални повърхности (B2-тип) – общ контекст и нови числени резултати	доцент д-р Веселин Тончев ИФХ – БАН
10:40-11:00	Кафе пауза	
	Водещ заседанието: проф. дн Илза Пъжева - ИБФБМИ – БАН	
11:00-11:20	Разпределена софтуерна система за обработка, анализ и числени симулации на физикохимични процеси, протичащи в атмосферата	гл.ас. д-р Атанас Терзийски ПУ „Паисий Хилендарски”
11:20-11:40	Неемпирично изследване на нелинейните оптични свойства на кондензирани хетероциклични олигомери, съдържащи азот, кислород и сяр	гл. ас. д-р Милена Спасова ИОХЦФ – БАН
11:40-12:00	Молекулно-динамични симулации на мицелообразуване в разтвори на $C_{12}E_x$	докторант Мария Велинова СУ „Климент Охридски”

12:00-12:20	Разпределена инфраструктура за високо-производителни изчисления в областта на изчислителната химия	доцент д-р Емануил Атанасов ИИКТ – БАН
12:20-12:40	Хибриден класификационно-регресионен подход за QSPR моделиране на антирадикална активност на полифеноли: сравнителен анализ на дескриптори, базирани на изходните полифеноли и на производните феноксилни радикали	гл. ас. д-р Петко Алов ИБФБМИ – БАН
12:40-14:00	Обяд	
	Водещ заседанието: проф. дн Георги Вайсиров - СУ „Климент Охридски”	
14:00-14:20	Формиране на водородни връзки между метанол и Cl, F, NH ₂ , OH и COOH заместени органични молекули. Изследване с Теорията на Функционала на Плътността	докторант Стефан Колев СУ „Климент Охридски”
14:20-14:40	Приложение на програмния пакет AMMOS_ProtLig за пост-докинг оптимизация на протеин-лигандни взаимодействия	докторант Десислава Жерева - ИБФБМИ – БАН
14:40-15:00	Влияние на противойонната конфигурация върху характеристиките на проводящ полианилин	докторант Жасмина Петрова СУ „Климент Охридски”
15:00-15:20	Теоретично изследване върху координационната способност на 2,2'-дипиридиламин по отношение на Au ^{III} .	докторант Паулина Гороломова СУ „Климент Охридски”
15:20-15:40	Групиране на стъпала върху вицинална кристална повърхност - нестационарно решение на модела на Бъртън, Кабрера и Франк в кинетичен режим	доцент д-р Богдан Рангелов ИФХ – БАН
15:40-16:00	Кафе пауза	
	Водещ заседанието: доц. д-р Веселин Тончев - ИФХ -БАН	
16:00-16:30	Пленарен доклад: Полимери със свръхпроводящо състояние	проф. дн Николай Тютюлков
16:30-16:50	Квантово химичен софтуер с отворен код за моделиране на свойствата на периодични кристални и наноструктури инсталиран на изчислителен комплекс Мадара	доцент д-р Валентин Алексиев ИК – БАН
16:50-17:10	Приблизителен скейлинг и анизотропия на грапави повърхности	доцент д-р Олег Йорданов ИЕ - БАН
17:10-17:30	Възможна ли е десмотропия при 2-метилтио-имидазолини?	доцент дн Венелин Енчев ИОХЦФ-БАН
17:30-18:30	Свободна дискусия извън лекционната зала – На чаша вино с „МАДАРА”	

21 октомври		
	Водещ заседанието: доц. дн Венелин Енчев - ИОХЦФ-БАН	
9:15-10:00	Пленарен доклад: Вътрешномолекулен пренос на протони във възбудено състояние, конични сечения върху съответните повърхнини на потенциалната енергия и свързани с това фотофизични проблеми	проф. дн Хозе Канети ИОХЦФ-БАН
10:00-10:20	Моделиране на реакционните пътища на възбудените състояния на фотопроекти при ацетилацетона, цитозина и изоцитозина	доцент д-р Васил Делчев ПУ „Паисий Хилендарски”
10:20-10:40	Експериментално и теоретично изследване на структурата на 6-(пропан-2-ил)-3-метил-морфолин-2,5-дион, неговите диастереоизомери, тавтомери и анионни производни	гл. ас. д-р Лалка Даскалова ИОХЦФ-БАН
10:40-11:00	Кафе пауза	
	Водещ заседанието: доц. д-р Наташа Трендафилова - ИОНХ – БАН	
11:00-11:20	On-line докладване (webinar) от Япония Тавтомерно равновесие: Когато/ако теорията съответства на експеримента	доц. д-р Людмил Антонов ИОХЦФ-БАН
11:20-11:40	On-line докладване (webinar) от Япония Дизайн на тавтомерни превключватели и сензори: Изненадите на реалността	докторант Вера Денева ИОХЦФ-БАН
11:40-12:00	DFT квантовохимични изчисления на халкони с потенциална антитуморна активност. Възможности на ab initio и DFT пресмятанията за точно предсказване на ИЧ спектри на молекули, аниони и радикали, съдържащи цианогрупа	гл. ас. д-р Симеон Стоянов ИОХЦФ-БАН
12:00-12:20	QSAR моделиране на пирол хидразони като нови антитуберкулозни агенти	гл.ас. д-р Иглика Лесигярска ИБФБМИ – БАН
12:20-12:40	DFT/B3LYP изчисленията като полезен инструмент при предсказване и обяснение на антиоксидантната активност	гл. ас. д-р Силвия Ангелова ИОХЦФ – БАН
12:40-14:00	Обяд	
	Водещ заседанието: проф. дн Светлана Симова – ИОХЦФ - БАН	
14:00-14:20	Експериментално определяне и теоретично предсказване на посоките на вибрационни моменти на преход при нискосиметрични планарни молекули	доцент д-р Марин Рогожеров ИОХЦФ - БАН

14:20-14:40	Приложение на ЯМР спектроскопията и изчислителните методи за изследване на химичен обмен	доцент д-р Николай Василев ИОХЦФ - БАН
14:40-15:00	Изследвания върху конформацията и конфигурацията на заместени пиролидини	гл. ас. д-р Павлета Цветкова ИОХЦФ - БАН
15:00-15:20	Подреденост на веригите от поли(бутил- α -цианоакрилат) в наночастици: ЯМР спектроскопия и DFT изчисления	гл.ас. д-р Надежда Маркова ИОХЦФ - БАН
15:20-15:50	Кафе пауза	
	Водещ заседанието: доц. д-р Богдан Рангелов - ИФХ -БАН	
15:50-16:20	On-line докладване (webinar) от Германия Капилярен поток в нанотръбички и тесни пори, облицовани с покритие от тип „полимерна четка”	проф. дхн Андрей Милчев ИФХ -БАН
16:20-16:40	Локална структура на Mn^{4+} и Fe^{3+} йони като спин-сонди в слоест $LiAlO_2$: експериментален анализ и моделиране на параметъра на разцепване в нулево магнитно поле	доцент д-р Радостина Стоянова ИОНХ – БАН
16:40-17:00	Експериментално и теоретично изследване на спектралните свойства на заместени арил хидразони на N-хексил-1,8-нафталимиди	гл. ас. д-р Диана Чешмеджиева СУ „Климент Охридски”
17:00-17:20	Групиране без компресия на стъпала върху вицинални повърхности (B1-тип) – моделна йерархия, числени резултати и примери от експерименти	докторант Диана Петрова-Димитрова ИФХ -БАН
17:20-17:30	Закриване на конференцията - проф. дн Петко Иванов - ИОХЦФ-БАН	