

День первый

| Время начала | | Докадчик | Извание | Секция |
|--------------|--------|--|---|--------------------------------|
| СЕТ | Moscow | | | |
| 12:00 | 13:00 | Сергей Баронов | Вступительное слово | Открытие конференции |
| 12:10 | 13:10 | Александра Фрейдзон | Александр Александрович Грановский | |
| 13:00 | 14:00 | Олег Громов | Насколько хорошо теория функционала плотности описывает спиновую плотность | Разные стороны расчетной химии |
| 13:30 | 14:30 | Денис Тихонов | Откуда берётся туннельное расщепление во вращательных спектрах дифенилового эфира? | |
| 14:00 | 15:00 | Алексей Гербст | Сопоставление результатов различных вычислительных методов для расчета возможной стабилизации гликозил-катионов | |
| 14:30 | 15:30 | BREAK (approx. 1 hour; depends on situation) | | |
| 15:30 | 16:30 | Владимир Рыбкин | Dynamics of the bulk hydrated electron from many-body electronic structure theory and machine learning | Kingdom far far away |
| 16:00 | 17:00 | | | |
| 16:30 | 17:30 | Ксения Бравая | Electronic structure for metastable electronic states | |
| 17:00 | 18:00 | Илья Попов | Теоретическое исследование углеродных кластеров на поверхности меди | |
| 17:30 | 18:30 | Валерий Скутельник | Infrared spectroscopy as a probe of electronic energy transfer | |
| 18:00 | 19:00 | | | |

День второй

| Время начала | | Докадчик | Извание | Секция |
|--------------|--------|---------------------|--|--------------------------------|
| СЕТ | Moscow | | | |
| 9:00 | 10:00 | Владимир Орел | Квантовохимическое исследование суперосновно-катализируемой сборки тетрациклических производных фронталина из кетонов и ацетиленов | Theory &/vs. Experiment |
| 9:30 | 10:30 | Вадим Батаев | Сложный характер низкочастотных колебаний в основном и возбужденных электронных состояниях молекулы фурфурола | |
| 10:00 | 11:00 | Юрий Вишневецкий | Молекулярные структуры димеров диамантила и оксадиамантила - экспериментальное и теоретическое исследование | |
| 10:30 | 11:30 | Антон Стасюк | Циклический углерод C ₁₈ : наименьший углеродный акцептор электронов | |
| 11:00 | 12:00 | Дмитрий Шарапа | Синтез перекиси водорода и окисление угарного газа – DFT и не только | |
| 11:30 | 12:30 | BREAK | | |
| 12:30 | 13:30 | Александра Фрейдзон | Многоконфигурационные методы в органической электронике и фотонике | Methods, software, development |
| 13:00 | 14:00 | Валера Верязов | Разработка и поддержка квантовохимических пакетов на примереMOLCAS/OpenMolcas | |
| 13:30 | 14:30 | Леонид Ширков | Application of Symmetry-adapted perturbation theory (SAPT) for construction of transferable intermolecular potentials | |
| 14:00 | 15:00 | Ксения Комарова | Non-adiabatic transfer following an ultrafast excitation: A novel dynamical isotope effect | |
| 14:30 | 15:30 | Алексей Кузнецов | Complexes of Graphene with P-Core-Modified Porphyrin: Computational Studies | |
| 15:00 | 16:00 | THE END | | |