

Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ - 2021

Секция «Химия»

12-23 апреля 2021



lomonosov2021.chem.msu.ru













Отв. ред.: Дзубан А.В., Коваленко Н.А.

М34 Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2021», секция «Химия». — М.: Издательство «Перо», 2021. — 80 МБ. [Электронное издание]. — Систем. требования: процессор х86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280х1024 High Color (32 bit). — Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00189-092-8



О КОНФЕРЕНЦИИ

В 2021 году традиционная **Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных** «**Ломоносов**» проходила с 12 по 23 апреля в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова в рамках Международного молодёжного научного форума «Ломоносов». Председателем центрального оргкомитета является ректор МГУ академик Виктор Антонович Садовничий.

Основная цель конференции «Ломоносов» — развитие творческой активности студентов, аспирантов и молодых учёных, привлечение их к решению актуальных задач современной науки, сохранение и развитие единого международного научнообразовательного пространства, установление контактов между будущими коллегами.

Для участия в конференции приглашались студенты (специалисты, бакалавры или магистры), аспиранты, соискатели и молодые учёные (без степени кандидата наук) любой страны мира в возрасте до 35 лет (включительно) — учащиеся или сотрудники российских и зарубежных вузов, аспиранты и сотрудники научных учреждений.

Официальные языки конференции: русский и английский.

В 2021 году работа конференции проходила по 41 секции, отражающей все основные направления современной фундаментальной и прикладной науки.

Секция «Химия» традиционно включала в себя следующие подсекции:

- 1. Аналитическая химия
- 2. Высокомолекулярные соединения
- 3. Дисперсные системы и поверхностные явления
- 4. История химии
- 5. Катализ
- 6. Неорганическая химия I (студенты)
- 7. Неорганическая химия II (аспиранты и молодые учёные)
- 8. Органическая химия
- 9. Радиохимия и радиоэкология
- 10. Физическая химия І: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия
- 11. Физическая химия ІІ: химическая термодинамика и химическая кинетика
- 12. Физическая химия III: процессы с участием ионов и радикалов в конденсированных средах и на межфазных границах (электрохимия, химия высоких энергий, спиновая химия)
- 13. Химическая технология и новые материалы
- 14. Химия живых систем, нанобиоматериалы и нанобиотехнологии

Было подано 1532 заявки, принято 1372, из них 582 устных доклада и 790 стендовых. 1199 авторов приняли участие.

Секция «Химия» в 2021 году работала дистанционно (с помощью платформы Zoom) с частично очным участием (только устных докладов и на отдельных подсекциях). Стендовые сессии проходили в формате заочного обсуждения постеров на сайте секции. В некоторых подсекциях были организованы дополнительные видеоконференции в Zoom с устным обсуждением стендовых докладов.

Вся информация о содержании секции «Химия» и итогах её работы доступна на сайте https://lomonosov2021.chem.msu.ru.





ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель: Калмыков Степан Николаевич, *чл.-корр. РАН, проф., декан химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

Заместитель председателя: Зверева Мария Эмильевна, д.х.н., доц., зам. декана химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова по научной работе

Авдеев Виктор Васильевич, д.х.н., проф.

Белоглазкина Елена Кимовна, д.х.н., проф.

Клячко Наталья Львовна, д.х.н., проф.

Матвеенко Владимир Николаевич, д.х.н., проф.

Цирлина Галина Александровна, д.х.н., проф.

Ларин Александр Владимирович, д.х.н., в.н.с.

Бадун Геннадий Александрович, к.х.н., доц.

Богатова Татьяна Витальевна, к.х.н., доц.

Глебов Илья Олегович, к.ф.-м.н., доц.

Ефимова Анна Александровна, к.х.н., доц.

Истомин Сергей Яковлевич, к.х.н., доц.

Касьянов Иван Алексеевич, к.х.н., доц.

Розова Марина Геннадьевна, к.х.н., доц.

Ставрианиди Андрей Николаевич, к.х.н., доц.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель: Калмыков Степан Николаевич, *чл.-корр. РАН, проф., декан химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

Заместитель председателя: Зверева Мария Эмильевна, д.х.н., доц., зам. декана химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова по научной работе

Якубович Екатерина Вячеславовна, к.х.н., начальник научного отдела химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Ученый секретариат:

Коваленко Никита Андреевич, к.х.н., доц., председатель совета молодых учёных химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Дубинина Татьяна Валентиновна, к.х.н., с.н.с.

Дзубан Александр Владимирович, м.н.с.

Карпушкин Евгений Александрович, к.ф.-м.н., доц.

Беркович Анна Константиновна, к.х.н., с.н.с.

Комкова Мария Андреевна, к.х.н., с.н.с.

Пуголовкин Леонид Витальевич, к.х.н., н.с.

Жуковская Евгения Сергеевна, к.х.н.

Клещина Надежда Николаевна, к.х.н.

Шнитко Алексей Валерьевич, к.х.н.

Смирнов Сергей Александрович, н.с.

Никифоров Александр Игоревич, м.н.с.

Владимирова Надежда Владимировна

Строганова Екатерина Андреевна





ПАРТНЁРЫ



Международный молодёжный научный форум «Ломоносов–2021»

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова





Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Совет молодых учёных химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова





Студенческий совет химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Научно-популярный журнал «Химия и жизнь»







секция «лимия»

Применение квантовых вычислений для расчета основного состояния молекулы СО

Мальков М.Н. 1 , Измоденов Д.В. 1 , Петряйкин Φ .A. 2

Аспирант, 1 год обучения

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, факультет фундаментальной медицины, Москва, Россия E-mail: maxim.malkov@apd.chem.msu.ru

Практические проблемы моделирования квантовых систем на современных классических компьютерах хорошо известны в сообществах квантовой химии и квантовой физики. Ни один из существующих на данный момент методов расчетов не может гарантировать высокую точность и быстродействие одновременно.

Бурно развивающиеся наука и практика применения квантовых вычислениях могут стать хороших подспорьем для задач квантовой химии [1]. В последние два десятилетия были достигнуты значительные успехи в разработке алгоритмов [2-4] и физического оборудования [5-7] для квантовых вычислений, предвещая революцию в моделировании квантовых систем.

В настоящей работе мы продемонстрировали возможность расчета кривой потенциальной энергии молекулы СО в минимальном базисном наборе STO-3G при помощи эмулятора квантового компьютера. На первом этапе был построено кубитное представление гамильтониана при помощи преобразования Жордана-Вигнера в формализме вторичного квантования. Сам расчет проводился при помощи разработанного метода кубитных связанных кластеров [8], полученные результаты сравнивались с рассчитанными в классическом методе связанных кластеров и методе полного КВ.

Литература

- 1. Cao, Yudong, et al. "Quantum chemistry in the age of quantum computing." Chemical reviews 119.19 (2019): 10856-10915.
- 2. Johnson, Peter D., et al. "QVECTOR: an algorithm for device-tailored quantum error correction." arXiv preprint arXiv:1711.02249 (2017).
- 3. Sawaya, Nicolas PD, and Joonsuk Huh. "Quantum algorithm for calculating molecular vibronic spectra." The journal of physical chemistry letters 10.13 (2019): 3586-3591.
- 4. Guerreschi, Gian Giacomo, and Mikhail Smelyanskiy. "Practical optimization for hybrid quantum-classical algorithms." arXiv preprint arXiv:1701.01450 (2017).
- 5. Brown, Kenneth R., Jungsang Kim, and Christopher Monroe. "Co-designing a scalable quantum computer with trapped atomic ions." npj Quantum Information 2.1 (2016): 1-10.
- 6. Everitt, Henry O., ed. Experimental aspects of quantum computing. Vol. 61. Berlin: Springer, 2005.
- 7. Gambetta, Jay M., Jerry M. Chow, and Matthias Steffen. "Building logical qubits in a superconducting quantum computing system." npj Quantum Information 3.1 (2017): 1-7.
- 8. Ryabinkin, Ilya G., et al. "Qubit coupled cluster method: a systematic approach to quantum chemistry on a quantum computer." Journal of chemical theory and computation 14.12 (2018): 6317-6326.





Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2021», секция «Химия»

Издательство «Перо»

109052, Москва, Нижегородская ул., д. 29-33, стр. 27, ком. 105

Тел.: (495) 973-72-28, 665-34-36

Подписано к использованию 26.04.2021.

Объем 80 Мбайт. Электрон. текстовые данные.(CD-ROM). Заказ 354.