

Сведения о научных руководителях

диссертации Степановой Анны Валерьевны

«Регуляризирующие алгоритмы расчета силовых полей многоатомных молекул методом масштабирующих множителей»

Научный руководитель: Кочиков Игорь Викторович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: нет

Научная специальность: 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Должность: лаборатория вычислительного эксперимента и моделирования, программист

Место работы: Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр

Адрес места работы: 119234 Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 4

Тел.:

E-mail:

Список основных научных публикаций по специальности 01.01.03—математическая физика за последние 5 лет:

1. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, I. V. Kochikov, O. A. Kondakova, V. B. Sulimov, A. V. Tikhonravov. High-performance atomistic modeling of optical thin films deposited by energetic processes. // Int. Journal of High-Performance Computing Applications. — 2015. — V. 29. — No. 2. — P. 184.
2. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, E. V. Katkova, I. V. Kochikov, O. A. Kondakova, V. B. Sulimov, A. V. Tikhonravov. Full-atomistic nanoscale modeling of the ion beam sputtering deposition of SiO₂ thin films. // J. of on-Crystalline Solids. — 2016. — V. 448. — P. 1.
3. I. V. Kochikov, D. M. Kovtun, Yu. I. Tarasov. Electron diffraction analysis for the molecules with degenerate large amplitude motions: Intramolecular dynamics in arsenic pentafluoride. // J. Mol. Struct. — 2017. — V. 1132. — P. 139.
4. Б. Н. Миронов, В. О. Компанец, С. А. Асеев, А. А. Ищенко, И. В. Кочиков, О. В. Мисочко, С. В. Чекалин, Е. А. Рябов. Наблюдение когерентных оптических фононов, возбужденных фемтосекундным лазерным излучением в пленках Sb, методом сверхбыстрой электронной дифракции. // ЖЭТФ. — 2017. — Т. 151. — Вып. 3. — С. 494.

5. Yu. I. Tarasov, I. V. Kochikov. Pseudo-conformer models for linear molecules: Joint treatment of spectroscopic, electron diffraction and ab initio data for the C_3O_2 molecule. // J. Mol. Struct. — 2018. — V. 1162. — P. 117.

Научный руководитель: Курамшина Гульнара Маратовна

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: доцент/с.н.с. по специальности № 02.00.04 Физическая химия с 19 июня 1992 г.

Научная специальность: 02.00.04 - Физическая химия

Должность: ведущий научный сотрудник кафедры физической химии химического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова

Место работы: кафедра физической химии, химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова

Адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет

Тел. :

E-mail:

Список основных научных публикаций по специальности 01.01.03 – математическая физика за последние 5 лет:

1. **Kuramshina G.M.**, Yagola A.G. Applications of regularizing algorithms in structural chemistry. // Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications. — 2017. — V. 5. — No. 3 — P. 53.
2. **Kuramshina G.M.**, Yagola A.G. Regularizing algorithms for solving nonlinear ill-posed problems of vibrational spectroscopy. Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications. — 2017. — V. 4. — No. 3. — P. 14.
3. Кочкиков И.В., **Курамшина Г.М.**, Пентин Ю.А., Ягола А.Г. Обратные задачи колебательной спектроскопии: монография. — 2017. — М.: КУРС. — С. 226.
4. **Kuramshina G.M.**, Vakula O.A., Vakula N.I., Majouga A.G., Senyavin V.M., Gorb Leonid G., Leszczynski Jerzy. Conformations, vibrational

spectra and force field of 1-methyl-2-(2'-pyridyl)benzimidazole: experimental data and density functional theory investigation in comparison with 2-(2'-pyridyl)benzimidazole. // Structural Chemistry. — 2016. — V. 27. — No. 1. — P. 209.

5. Сенявин В.М., Фекличев Е.Д., Захаров В.Н., **Курамшина Г.М.**, Асланов Л.А. Нанокристаллы кремния, стабилизированные органическими радикалами: спектральное и теоретическое исследование. // Координационная химия. — 2015. — Т. 41. — С. 195.
6. Yagola A.G., Kochikov I.V., **Kuramshina G.M.**, Pentin Ya A. Inverse Problems of Vibrational Spectroscopy. —Walter de Gruyter GmbH Berlin, Boston. —2014. — P.298.
7. **Kuramshina Gulnara**, Kochikov Igor, Yagola Anatoly, Stable Numerical Methods of Approaching Quantum Mechanical Molecular Force Fields to Experimental Data. // Applied Inverse Problems. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics. — 2013. — V. 48. — P. 165.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.01.06
профессор

П.А. Поляков