

Программа XXXIV симпозиума «Современная химическая физика»

16 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

Заезд участников. Регистрация.

17 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Утренняя сессия

Ведущий: д.ф.-м.н. Гришин М.В.

10.00 Открытие Симпозиума

10.30 **Флид Виталий Рафаилович** "Гетерогенное гидрирование карбоциклических соединений норборненового ряда: особенности кинетики и механизма"

11.10 **Чумакова Наталья Анатольевна** "Свойства жидкости, интеркалированной в межплоскостное пространство оксида графита, по данным спектроскопии ЭПР"

Вечерняя сессия

Биохимическая физика, нанобиология

Ведущий: д.ф.-м.н. Гришин М.В.

15.00 **Иванов Сергей Петрович** "Спектрально-люминесцентный метод определения констант диссоциации производных урацила в водных растворах"

15.15 **Горбунова Иоанна Алексеевна** "Исследование анизотропной безызлучательной релаксации в возбужденном состоянии NADH методом поляризационной спектроскопии "накачка-зондирование" в растворах различной вязкости и полярности"

15.30 **Волков Денис Андреевич** "Исследование конформации кофермента NADH методом классической молекулярной динамики"

15.45 **Таюпов Мансаф Масхутович** "Диссоциативный распад молекул пентахлорфенола и 2,4,6-трихлорфенола при взаимодействии с электронами низких энергий"

16.00 Перерыв

16.10 **Яковлев Алексей Николаевич** "Динамика концентраций основных нейромедиаторов и кривая BOLD ответа на короткий зрительный стимул, измеренные при помощи протонной МРС"

16.25 **Генералова Анастасия Андреевна** "Структурные изменения конденсированной ДНК в клетках *Escherichia coli* под воздействием 4-гексилрезеоцина"

16.40 **Игнатов Максим Александрович** "Исследование образования критических повреждений ДНК в клетках глиобластомы человека"

16.55 **Осипов Андрей Андреевич** "Особенности репарации радиационно-индуцированных двунитевых разрывов ДНК в нейральных стволовых клетках"

18 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, нанобиология

Ведущий: к.ф.-м.н. Гатин А.К.

9.00 **Рошаль Сергей Бернардович** "Физическая вирусология: симметрия и электростатика"

9.40 **Коневцова Ольга Викторовна** "Многооболочечные вирусы: структура и физико-химические особенности инфицирования"

9.55 **Рошаль Дарья Сергеевна** "Изменение формы вирусных капсидов при их созревании и при изменении pH окружающего раствора"

10.10 **Авдошин Александр Александрович** "Термодинамические и кинетические свойства координации олигомеров хитозана с инсулином. Молекулярно-динамическое исследование"

10.25 Перерыв

10.30 **Кузнецов Денис Михайлович** "Липосомы, модифицированные ПАВ, для трансдермальной доставки гидрофильных и гидрофобных субстратов"

10.45 **Кузнецова Дарья Александровна** "Самоорганизующиеся системы на основе имидазолиевых ПАВ с метоксифенильным фрагментом: синтез, агрегация, антимикробная и цитотоксическая активность"

11.00 **Васильева Лейсан Альбертовна** "Трансдермальная доставка оксимов как новый подход в терапии отравления фосфорорганическими соединениями"

11.15 **Кушназарова Рушана Абдурашитовна** "Карбаматные ПАВ как добавки, улучшающие стабильность и мембранотропные свойства систем доставки лекарственных веществ"

11.30 **Зайцева Елена Сергеевна** "Моделирование равновесной формы малой капли на открытой поверхности"

11.45 **Киров Михаил Вениаминович** "Механизмы безбарьерной реорганизации водных наноструктур"

12.00 **Гришин Максим Вячеславович** "Влияние ориентации молекул CO на восстановление окисленных наночастиц никеля"

12.15 **Харламов Владимир Федорович** "Структура и свойства веществ с отрицательной диэлектрической проницаемостью"

12.30 **Дворецкая Елизавета Витальевна** "Композитная платформа на основе моно-ионного комплекса Er^{3+} и магнитных микрочастиц PrDyFeCoB "

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, нанобиология

Ведущий: д.ф.-м.н. Гришин М.В.

14.30 **Трахтенберг Леонид Израйлевич** "Влияние взаимодействия наночастиц на структурные, проводящие и сенсорные свойства смешанных оксидов"

15.10 **Тверьянович Юрий Станиславович** "Кристаллические и стеклообразные неорганические полупроводники с повышенной пластичностью"

15.25 **Лебедев Николай Геннадьевич** "Модель взаимодействия электронов проводимости и намагниченности в деформированном кручением ферромагнетике"

15.40 **Кашин Сергей Николаевич** "Контроль величины магнитокалорического эффекта в многослойных структурах"

15.55 **Лебедева Ольга Сергеевна** "Сравнительный анализ эластопроводимости нанолент семейства графена"

16.10 **Бахметьев Максим Владимирович** "Сдвиг резонансных частот рассеяния спиновых волн в обменно-смещенной гетероструктуре NiFe/Cu/IrMn "

16.25 **Зайцева Елена Сергеевна** "Разделяющая поверхность на границе раздела кубических фаз ограниченной формы"

16.40 **Бахметьев Максим Владимирович** "Корреляция между ширинами линий FMR и BLS в обменно-смещенных тонких пленках NiFe/Cu/IrMn с переменной толщиной Cu"

16.55 Перерыв

17.00 **Самсонов Владимир Михайлович** "Прогнозирование поверхностной сегрегации в бинарных наночастицах Pt-Pd и тернарных наночастицах Pt-Pd-Ni с использованием атомистического и термодинамического моделирования"

17.15 **Гатин Андрей Константинович** "Локальная неоднородность адсорбционных свойств наночастиц золота, никеля и платины"

17.30 **Самсонов Владимир Михайлович** "Моделирование процесса избирательной коррозии в наносплавах на основе платины как способа синтеза биметаллических наночастиц"

17.45 **Дьячкова Татьяна Петровна** "Композиты на основе синергетически взаимодействующих углеродных наноструктур"

18.00 **Гензе Илья Юрьевич** "Влияние физико-химических процессов, индуцированных отжигом, на параметры контакта металл/InAlAs"

18.15 **Трофимов Ренат Рамильевич** "Предельно короткие импульсы в оптически анизотропной среде с углеродными нанотрубками в условиях пьезоэффекта"

18.30 **Титков Александр Игоревич** "Материалы и технологии цифровой 2D- и 3D-печати компонентов электроники и электрохимических устройств"

19 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 1 (нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, химическая физика поверхности, нанобиология, биохимическая физика, биофотоника, перспективные функциональные наноматериалы)

1. **Аль Алвани Аммар Жабер** "Эффекты смешиваемости молекул порфирина и жидких кристаллов в монослое Ленгмюра на границе раздела воздух-вода"

2. **Васильева Лейсан Альбертовна** "Эффективность модифицированных липосом в доставке митохондриальных ядов"

3. **Гавриков Максим Владимирович** "Использование технологии Ленгмюра-Блоджетт для получения проводящих пленок на основе углеродных материалов"

4. **Гавриков Максим Владимирович** "Влияние температуры субфазы на формирование монослоев Ленгмюра производного порфирина push-pull типа"

5. **Гак Владимир Юрьевич** "Фотоиницированный транспорт носителей заряда в слоях коллоидных квантовых точек PbS: влияние лигандных оболочек"

6. **Глуховской Евгений Геннадьевич** "О методических основах исследования монослоев Ленгмюра: применение 3D методик для описания квази-2D объектов"

7. **Гребенщиков Юрий Борисович** "Метод сканирующей магнитометрии для определения характеристик слабомагнитных и магнитно-мягких материалов"

8. **Бахметьев Максим Владимирович** "Электронный транспорт в ферримагнитных структурах $Gd_{24.6}(Fe_{90}Co_{10})_{75.4}/Ir/Gd_{24.6}(Fe_{90}Co_{10})_{75.4}$ "

9. **Дьячкова Татьяна Петровна** "Управление параметрами углеродных наноматериалов на стадии получения катализатора"
10. **Ерыженков Александр Владимирович** "Модельное описание электронной структуры графена с индуцированными обменным и спин-орбитальным взаимодействиями"
11. **Завьялов Сергей Алексеевич** "Структурные изменения пленок нанокомпозитов поли-п-ксилилен - сульфид кадмия с ростом концентрации наполнителя"
12. **Завьялов Сергей Алексеевич** "Влияние содержания наполнителя на ИК-спектры пленок поли-п-ксилилен - сульфид кадмия разной толщины "
13. **Ивичева Светлана Николаевна** "Сравнительное исследование сиалонов, полученных из разных прекурсоров методом ИК спектроскопии"
14. **Ивичева Светлана Николаевна** "Эволюция фазовых превращений алюмосиликатных ксерогелей в атмосфере азота по данным рентгенофазового анализа и ИК спектроскопии"
15. **Кушназарова Рушана Абдурашитовна** "Биосовместимые микроэмульсии и эмульгели в качестве наноконтейнеров для абиетиневой кислоты"
16. **Мальтанова Анна Михайловна** "Электровосстановление кислорода на слоях нанотрубок TiO_2 , модифицированных наночастицами золота и серебра"
17. **Озерин Сергей Александрович** "Синтез и свойства наночастиц никеля, полученных электрическим взрывом проволоки"
18. **Петрушенко Игорь Константинович** "Моделирование адсорбции водорода в щелевидных порах с помощью современных методов квантовой химии"
19. **Прокофьев Сергей Ильич** "Временная динамика продольного теплового движения в ансамблях нановключений жидкого свинца на закрепленных дислокациях в алюминии"
20. **Ракша Елена Владимировна** "Морфология углеродных наночастиц, генерируемых на основе терморасширяющихся соинтеркалатов нитрата графита"
21. **Садков Анатолий Петрович** "Влияние водорода на окисление метана пероксидом водорода *in situ* в присутствии тиолатных кластеров золота в мягких условиях"
22. **Титков Александр Игоревич** "Формирование с использованием прямой струйной 3Д-печати и исследование микроструктуры анодных материалов для твёрдооксидных топливных элементов на основе композиций NiO/CGO и NiO/YSZ "
23. **Уракова Елизавета Алексеевна** "Наночастицы на основе амфифильных сополимеров N-винилпирролидона и метилфеофорбида как перспективные фотосенсибилизаторы для фотодинамической терапии"
24. **Цибульникова Анна Владимировна** "Спектральное смещение плазмонного максимума на LIPSS титана в присутствии нанометровой пленки ПВС"

25. **Чибриков Антон Сергеевич** "Эластопроводимость примесных германеновых нанолент"
26. **Антонов Денис Олегович** "Кислотно-основные свойства гидратированной поверхности модифицированного гамма Al_2O_3 "
27. **Мельгунова Елена Александровна** "Прямой способ вычисления коэффициентов уравнения Дубинина-Астахова для описания адсорбции в области средних заполнений"
28. **Иванова Анна Николаевна** "Термодинамический метод расчета растворимости продуктов коррозии в теплоносителе для АЭС типа ВВЭР"
29. **Ракитин Владимир Валерьевич** "Влияние условий отжига на состав, морфологию и оптические свойства тонких пленок Cu_2NiSnS_4 "
30. **Ракитин Владимир Валерьевич** "Исследование времен жизни фотогенерированных носителей тока в поликристаллических порошках Cu_2SrSnS_4 и $Cu_{1.9}SrSnS_4$ "
31. **Свиридова Лиана Николаевна** "Адсорбционное поведение кукурбит[*n*]урилов (СВ6 и СВ7) в присутствии катиона стронция"
32. **Чоба Мария Алексеевна** "Анализ электрохимического поведения механически обновляемого графитового электрода в пропиленкарбонатных растворах"
33. **Андреев Сергей Михайлович** "Суперкатионные пептидные дендримеры - эффективные внутриклеточные транспортеры "
34. **Нагайникова Анастасия Алексеевна** "Применение функционализированных магнитных наночастиц $CoFe_2O_4$ для тераностики"
35. **Астанина Полина Николаевна** "Исследование структуры липидной мембраны с магнитными наночастицами $CoFe_2O_4$ "
36. **Балашов Евгений Михайлович** "Деструкция плазматических мембран гетерополикислотами (клеточные линии ФЭЧ и А549) "
37. **Дубенская Нина Андреевна** "Кинетика оксидативного гемолиза эритроцитов под действием пероксидного инициатора"
38. **Калинин Александр Петрович** "Определение коэффициента экстинкции атмосферы по данным гиперспектрального сенсора УФ-А диапазона"
39. **Летута Сергей Николаевич** "Кинетика наведенного поглощения молекул при двухквантовом ступенчатом возбуждении высоких триплетных состояний "
40. **Маркова Ангелина Вячеславовна** "Диссоциативный захват электронов в приложении к колебательной спектроскопической теории туннелирования электронов в одорантах"
41. **Федоров Алексей Александрович** "Об адекватности использования квазиравновесного подхода при моделировании полимеразной цепной реакции "
42. **Проскураков Иван Игоревич** "Фотофизика триплетных состояний бактериохлорофилла в реакционных центрах мутанта L177 Rb. sphaeroides"
43. **Зюбин Андрей Юрьевич** "Классификация массивов спектров комбинационного рассеяния света тромбоцитов статистическими методами"

44. **Айбуш Арсений Валерьевич** "Стационарная и время-разрешенная VCARS спектроскопия хлорофиллов"
45. **Демишкевич Елизавета Александровна** "Влияние плазмонных эффектов наночастиц родия на фотопроцессы ароматических аминокислот"
46. **Ананьева Оксана Альбертовна** "Синтез нанокпозиционного материала на основе оксида графена, модифицированного лигносульфонатом, для процессов жидкофазной адсорбции"
47. **Бураков Александр Евгеньевич** "Гибридный наноккомпозит "гидротермальный углерод/кремнезем" - эффективный универсальный адсорбент для очистки водных сред "
48. **Буракова Ирина Владимировна** "Синтез и сорбционные характеристики по отношению к радионуклидам европия материала на основе мезопористого углерода"
49. **Долматов Валерий Юрьевич** "Порошковый состав, содержащий детонационные наноалмазы (ДНА) - эффективная добавка в электролит износостойкого хромирования"
50. **Евщик Елизавета Юрьевна** "Исследование влияния состава электролита на электрохимические свойства высоковольтных материалов положительных электродов литий-ионных аккумуляторов"
51. **Евщик Елизавета Юрьевна** "Влияние типа связующего на электрохимические свойства кремниевого отрицательного электрода литий-ионного аккумулятора"
52. **Кузнецова Татьяна Сергеевна** "Гибридный наноструктурированный углеродный сорбент неорганических загрязнителей (на примере ионов тяжелых металлов)"
53. **Куницына Екатерина Игоревна** "Функционализация одноионного магнита Eg^{3+} с помощью ферромагнитных микрочастиц"
54. **Меметова Анастасия Евгеньевна** "Адсорбция метиленового синего на наноструктурном углеродном материале"
55. **Меметова Анастасия Евгеньевна** "Адсорбция метана на наноструктурном углеродном материале"
56. **Мкртчян Элина Сааковна** "Адсорбция свинца из водных растворов перфорированным оксидом графена"
57. **Нескоромная Елена Анатольевна** "Нанокпозиционный сорбционный материал оксид графена/лигнин/альгинат натрия для удаления ионов тяжёлых металлов из водных сред"
58. **Серомлянова Ксения Андреевна** "Новые подходы к синтезу многофункциональных пористых металлоорганических материалов на основе ионов никеля"
59. **Уваров Валерий Иванович** "Формирование ультрафильтрационных высокотемпературных, коррозионностойких, механически прочных керамических мембран с использованием метода СВС"
60. **Назаров Дмитрий Игоревич** "Строение и свойства монодепротонированного транс- $HIndigo^-$ аниона. Влияние депротонирования и восстановления на транс- $H_2Indigo$ "

61. **Фараонов Максим Алексеевич** "Координационные комплексы фталоцианина олова и его аналогов с соединениями переходных металлов"
62. **Осипов Никита Георгиевич** "Синтез и исследование анионных соединений замещенных тетрапиразинопорфиразинов"
63. **Романенко Никита Романович** "Высокоспиновые трехъядерных комплексы на основе металлофталоцианинов и их аналогов"

Вечерняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий: д.ф.-м.н. Медведев С.П.

16.00 **Тереза Анатолий Михайлович** "Численное моделирование сжигания газообразных продуктов пиролиза полиэтилена, полипропилена и автомобильных шин"

16.15 **Кислов Владимир Михайлович** "Получение горючего газа с низким содержанием смол при сверхадиабатической газификации древесины"

16.30 **Михалкин Виктор Николаевич** "Экспериментальное исследование диффузионного горения жидкости"

16.45 **Акулич Александр Николаевич** "Горение рисовой шелухи в циклонной печи"

17.00 Перерыв

17.10 **Долматов Валерий Юрьевич** "Прогнозная оценка влияния выхода детонационных наноалмазов в зависимости от их элементного состава"

17.25 **Кислов Владимир Михайлович** "Поглощение серосодержащих соединений путем добавки мрамора при фильтрационном горении модельных систем, содержащих сульфиды или сульфаты металлов"

17.40 **Иванцов Артем Николаевич** "Параметры ударных волн и фрагментов оболочки при исследовании разрыва сосуда высокого давления с помощью конической ударной трубы"

17.55 **Ахлюстин Илья Александрович** "Распространение низкоскоростной детонации в ВВ на основе ТАТБ и октогена"

18.10 **Медведев Сергей Павлович** "Переход горения в детонацию в трубе с многоступенчатым фокусирующим элементом"

20 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

Утренняя сессия

Квантовая химия

Ведущий: проф. Немухин А.В.

9.00 **Игнатов Станислав Константинович** "Необычные электронные свойства субнаноразмерных кластеров магния"

9.40 **Мирзаева Ирина Валерьевна** "Моделирование строения и транспортных свойств моноатомных нанопроволок с учетом релятивистских эффектов"

9.55 Перерыв

10.05 **Орел Владимир Борисович** "Квантовохимическое исследование каскадных реакций ацетилена"

10.20 **Лаврик Николай Львович** "Оценка вкладов электростатической и ковалентной составляющих в образование комплексов с водородной связью азолов с протоно акцепторными молекулами методами ИК спектроскопии и квантовой химии"

Вечерняя сессия

Квантовая химия

Ведущий: проф. Плахутин Б.Н.

16.00 **Немухин Александр Владимирович** "Достижения и проблемы метода квантовой механики/молекулярной механики (КМ/ММ) при моделировании химических реакций в белках"

16.15 **Савинцева Лиана Артуровна** "Компьютерный дизайн органических и биологических полупроводников для создания нейросетевого материала"

16.30 **Сызганцева Ольга Алексеевна** "Моделирование времен жизни носителей заряда в металлорганических координационных полимерах: теоретические аспекты и эффективные вычислительные подходы"

16.50 Перерыв

17.00 **Егиазарян Карен Тигранович** "К вопросу о точности методов DFT в расчетах активационных характеристик каталитического аллилирования норборнадиена"

17.15 **Абсалямов Дамир Зайнуллович** "Квантовохимическое исследование взаимопревращений ацетилена с галоген-замещенными анилинами в суперосновной среде KOH/DMSO"

17.30 **Туровцев Владимир Владимирович** "Применимость популярных функционалов при расчётах свойств веществ"

21 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

Утренняя сессия

Перспективные функциональные наноматериалы

Ведущий: член-корр. Алымов М.И.

9.00 **Новиков Юрий Николаевич** "Ближний порядок и перенос заряда в плёнках оксинитрида кремния"

9.15 **Шикин Александр Михайлович** "Новые синтетические слоистые топологические материалы серии $Mn_x(Sn,Pb,Ge)_{1-x}Bi_{2-y}(Sb_y)Te_{4-z}(Se_z)$ "

9.30 **Суслова Евгения Викторовна** "Получение поверхностно-модифицированного SiO_2 - матрицы-носителя контрастных агентов для энергочувствительной компьютерной томографии"

9.45 **Рыбкин Артем Геннадиевич** "Подрешеточный ферримагнетизм в квазисвободном графене"

10.00 **Рыбкина Анна Алексеевна** "Интеркаляция буферного слоя графена на $SiC(0001)$ атомами Co и Au для реализации магнитно-спин-орбитального графена"

10.15 **Бабкин Александр Викторович** "Композиционные аэрогели на основе восстановленного оксида графена, декорированного наночастицами железа, для сорбции тяжёлых металлов и радионуклидов из растворов сложного состава"

10.30 Перерыв

10.40 **Пигальский Константин Сергеевич** "Критический ток, магнитные и структурные характеристики ВТСП $YBaCuO$, слабо допированного железом"

10.55 **Саид-Галиев Эрнест Ефимович** "Сверхкритический диоксид углерода как среда в модификации полимеров, синтезе супрамолекулярных структур и создании новых эффективных материалов на их основе"

11.10 **Юхин Юрий Михайлович** "Получение наноразмерных порошков оксидов висмута"

11.25 **Каюмов Руслан Рифатович** "Полимерные натрий-ионные мембраны Нафион для пост-литиевых источников тока"

11.40 **Демина Варвара Анатольевна** "Биоразлагаемые композиты на основе полилактида и крахмала"

Вечерняя сессия

Химическая физика поверхности, кинетика и динамика химических реакций

Ведущий: проф. Трахтенберг Л.И.

15.00 **Терещенко Олег Евгеньевич** "Уникальные физико-химические и электронные свойства поверхностей топологических изоляторов V_2VI_3 "

15.20 **Грнев Иван Васильевич** "Новый адсорбционный метод для исследования размещения гетероатомов в структуре цеолитоподобных материалов"

15.35 **Дохликова Надежда Владимировна** "Дескриптор химической активности на примере адсорбции водорода на поверхности золотых наноструктур"

15.50 **Тарасов Артем Вячеславович** "Новые методики использования фотоэмиссии для анализа валентности и магнетизма поверхностных атомов 4f материалов на примере систем EuIr_2Si_2 и TbRh_2Si_2 "

16.05 Перерыв

16.15 **Грнев Иван Васильевич** "Скрининг металл-органических координационных полимеров для разделения смесей гелия и азота"

16.30 **Вяткина Мария Александровна** "Изменение адгезионной прочности соединений "эпоксидный олигомер - волокно" при отверждении ангидридом"

16.45 **Веселова Варвара Олеговна** "Механическая прочность тканей с антибактериальным покрытием в тропическом климате"

17.00 **Морозов Игорь Иллиодорович** "Кинетические процессы с участием галогенсодержащих соединений в окружающей среде"

17.15 **Степанов Илья Георгиевич** "Распределение концентраций положительных и отрицательных ионов в тропосфере"

17.30 **Дьяков Юрий Алексеевич** "Динамика возбужденных состояний интермедиатов криге CH_3CHO "

17.45 **Чайкина Юлия Александровна** "Парная корреляционная функция и уравнения состояния диоксида углерода в непосредственной близости от критической точки"

18.00 **Горячев Николай Сергеевич** "Компонентный анализ кинетики химической реакции по спектрам поглощения"

18.15 **Дубовицкий Владимир Абрамович** "Полихроматическая кинетика термических превращений высокоэнергетических полиазотистых соединений в вакууме"

22 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

Утренняя сессия

Элементарные процессы, фотохимия и радиационная химия

Ведущий: д.х.н. Чумакова Н.А.

9.00 **Пшеничнюк Станислав Анатольевич** "Захват медленных электронов молекулами биологически активных соединений"

9.40 **Лебедев-Степанов Петр Владимирович** "Параметрическое уширение вибронного спектра молекулы в связи с нулевыми колебаниями и тепловыми флуктуациями положений ядер"

9.55 **Асфандиаров Наиль Лутфурахманович** "Роуминг атомов в анионах, образующиеся при диссоциативном захвате электронов галогенированными ароматическими молекулами"

10.10 **Агеева Александра Андреевна** "Роль оптической конфигурации в элементарных превращениях биологически важных молекул. Исследование методами спиновой химии и оптической спектроскопии"

10.25 Перерыв

10.35 **Будыка Михаил Федорович** "Фотофизика и фотохимия молекулярных эксимеров"

10.50 **Лукин Леонид Викторович** "Диссоциация экситонов на границе между сопряженным полимером и акцептором электрона"

11.05 **Лукзен Никита Николаевич** "Магнитные и спиновые эффекты в состояниях с переносом заряда в триадах "донор электрона - жесткий молекулярный мостик - акцептор электрона"

11.20 **Поляков Николай Эдуардович** "Стереоселективность фотоиндуцированных реакций переноса электрона в липидных мембранах - моделирование взаимодействия лекарство-рецептор"

11.35 **Богомолов Александр Сергеевич** "Происходит ли деление синглетного экситона в димерах тетрацена?"

11.50 **Бабенко Семен Владимирович** "Влияние ионов металлов на фотохимическую активность биологически активных хинонов-хелаторов"

Вечерняя сессия

Высокомолекулярные соединения

Ведущий: к.ф.-м.н. Озерин С.А.

15.00 **Солдатова Анастасия Евгеньевна** "Влияние химической структуры диангирида на физико-химические свойства полиимидов на основе несимметричного 3,4-оксидианилина"

15.15 **Александров Артём Сергеевич** "Исследование самодиффузии полиэтиленгликоля PEG 4к+PEG 40к в растворе и расплаве"

15.30 **Поцелеев Владислав Владимирович** "Синтез комплексных соединений золота и нанокompозитных материалов на основе полилактида"

15.45 **Мельникова Дарья Леонидовна** "Особенности трансляционной подвижности белков с внутренней неупорядоченной структурой в водных растворах на примере α - и κ -казеинов"

16.00 **Хавпачев Мухамед Аликович** "Особенности деструкции биоразлагаемых полиэфилов в присутствии высокодисперсных частиц неорганической природы"

16.15 **Рощин Дмитрий Евгеньевич** "Моделирование радикальной полимеризации в микрокапле мономера при обтекании раствором инициатора"

16.30 Перерыв

16.40 **Кириллов Владислав Евгеньевич** "Полимерные нанокompозиты на основе наночастиц палладия"

16.55 **Копнов Александр Юрьевич** "Создание гибридных органо-неорганических нанокompозиционных полимерных материалов пониженной горючести на основе полиэтилена высокой плотности и наночастиц гидроксида алюминия"

17.10 **Копнова Татьяна Юрьевна** "Изучение кинетики высвобождения бриллиантового зеленого из нанокompозитных материалов на основе полилактида"

17.25 **Петров Валерий Алексеевич** "Гибридные композиты полидифениламин-2-карбоновой кислоты и активированного ИК-пирилизированного полиакрилонитрила"

17.40 **Петрова Туяра Валерьевна** "Влияние температуры и типа отвердителя на структуру и свойства эпоксиполисульфоновых систем, модифицированных фурфурилглицидиловым эфиром"

17.55 **Разуваева Екатерина Владимировна** "Стереокompлексообразование амфифильных блок-сополимеров лактида и оксида этилена как перспективная стратегия повышения стабильности мицеллярных носителей для адресной доставки лекарств"

23 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 2 (квантовая химия, горение и взрыв, элементарные процессы, химическая радиоспектроскопия, гомогенный и гетерогенный катализ, кинетика и динамика химических реакций, фотохимия и радиационная химия, высокомолекулярные соединения.)

1. **Бакулин Александр Викторович** "Влияние комбинации примесей на абсорбционные свойства кислорода в сплавах α_2 -Ti₃Al и γ -TiAl"

2. **Бакулин Александр Викторович** "Электронная структура, механические и тепловые свойства силицида титана Ti₅Si₃"

3. **Боженко Константин Викторович** "DFT расчеты кластеров Fe₂O₂ и Fe₂O₄ и продуктов их взаимодействия с молекулами H₂, O₂ и CO"

4. **Бреславская Наталья Николаевна** "Изотопные и спиновые эффекты, вызванные сжатием парамагнитных молекул"

5. **Бреславская Наталья Николаевна** "Квантово-химическое исследование метил-фенил и метил-трет-бутил комплексов гидроксаматов меди (II) и ванадия (IV)"
6. **Дошликова Надежда Владимировна** "DFT-моделирования окисления и восстановления наноструктур благородных и переходных металлов"
7. **Ересько Александр Борисович** "Внутримолекулярная динамика 4-[4-(2-аминоэтокси)бензил]анилина"
8. **Ковзик Валерия Михайловна** "Электронная структура вакансий кислорода в оксиде гафния, легированном Al, Y и La"
9. **Кузнецова Анна Александровна** "Отнесение полос поглощения валентных колебаний карбонильных групп в экспериментальном ИК спектре цефоперазона на основе квантовохимического расчета"
10. **Перевалов Тимофей Викторович** "Атомная и электронная структура кристаллических фаз легированного лантаном $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ "
11. **Савостина Людмила Ивановна** "Изучение фотоизомеризации 1,2-ди(4-пиридил)этилена методами ЯМР и УФ спектроскопии и квантово-химического моделирования"
12. **Стешин Илья Сергеевич** "Использование машинного обучения для прогнозирования структуры и энергии субнаноразмерных кластеров магния"
13. **Утенышев Андрей Николаевич** "Компьютерное моделирование обменного взаимодействия Mo с 3d- и 4d-металлами в комплексах с дитиооксамидом"
14. **Широкова Екатерина Алексеевна** "Малые нейтральные кластеры воды: влияние ориентационной изомерии на их термодинамические функции и газофазные концентрации"
15. **Галиуллин Игорь Гапильбариевич** "Влияние технологии синтеза триаминотриазобензола на физико-химические и газодинамические характеристики взрывчатых композиций на его основе"
16. **Зюзин Игорь Николаевич** "Энергетические возможности гидроксиламмониевых солей нитроаминных производных некоторых конденсированных гетероциклов в качестве компонентов смесевых топлив (СТ)"
17. **Калинин Александр Петрович** "Особенности использования оптоэлектронных методов для дистанционного исследования процессов горения и взрыва"
18. **Коптелов Александр Александрович** "Температурная зависимость времени задержки теплового взрыва энергетического композиционного материала, содержащего нитроэфир"
19. **Полианчик Евгений Викторович** "Реактор Swiss roll для окислительной конверсии газов"
20. **Полианчик Евгений Викторович** "Повышение эффективности окислительно-паровой конверсии углеводородов в синтез-газ"
21. **Дубина Юрий Макарович** "Динамика диссипативной двухуровневой квантовой системы (ДКС_2) в квазимонохроматическом импульсном лазерном поле"

22. **Карелин Александр Иосафович** "Параметры сильной водородной связи в кристаллах $(\text{DMCO})_2\text{H}+\text{ClO}_4^-$ "
23. **Сафронов Алексей Михайлович** "Диссоциативные распады отрицательных ионов хлорсодержащих молекул, образованных путем захвата электронов низких энергий"
24. **Борисенко Дмитрий Николаевич** "Фотохимические реакции с участием халькогенидов Ga, Ge и Nb"
25. **Захаров Виктор Владимирович** "Изучение термического разложения бис(метокси-NNO-азокси)-3-нитро-3-азабутана методами ДСК, ТГ и масс-спектрометрии"
26. **Озерский Алексей Валериевич** "Парциальное газофазное окисление этана и метан-этановых смесей в метанол и формальдегид"
27. **Старостин Алексей Данилович** "Окислительный крекинг пропан-этиленовых смесей"
28. **Сультимова Наталья Борисовна** "Исследование фотохимии и фотофизики набуметона и напроксена в структурно-организованных водных средах"
29. **Ульянов Алексей Владимирович** "Изменение группового состава углеводородных ракетных топлив в процессе экспериментов, моделирующих их длительное хранение"
30. **Будыка Михаил Федорович** "Новый фотохром на основе бис-стирилбензохинолиновой диады, функционирующий по механизму обратимой реакции $[2+2]$ фотоциклоприсоединения"
31. **Будыка Михаил Федорович** "Синтез и спектрально-люминесцентные свойства бифотохромной пиренилхинолилэтиленовой диады"
32. **Ершов Кирилл Сергеевич** "Генерация синглетного кислорода фотовозбуждением УФ-А, В, С столкновительных комплексов изопрен-кислород $\text{C}_5\text{H}_8\text{-O}_2$ в газовой фазе"
33. **Иванов Николай Аркадьевич** "Оценка эффективности генерации синглетного кислорода при световом возбуждении раствора метиленового синего"
34. **Иванов Николай Аркадьевич** "Новые протонпроводящие материалы на основе трековой полиэтилентерефталатной мембраны, модифицированной винильной фосфорсодержащей ионной жидкостью"
35. **Ли Виталий Моесеевич** "Фотохимические свойства бифотохромной диады на основе пиренилхинолилэтилена"
36. **Ли Виталий Моесеевич** "Фотонный переключатель на основе бифотохромной диады, содержащей фрагменты пиренилхинолилэтилена"
37. **Сизов Лев Ростиславович** "Диады фуллерен[60]-(цианиновый краситель) с поглощением в ближней ИК области спектра как агенты для фототераностики"
38. **Сипливый Николай Борисович** "Связь стоксового сдвига с параметром асимметрии в возбужденных октупольных молекулах"
39. **Багдатов Руслан Айдынович** "Конверсия этанола в алкановые и ареновые фракции"

40. **Баташев Сергей Александрович** "Совмещенный процесс синтеза циклогексилциклогексанкарбоксилата из циклогексанола и CO"
41. **Волкова Нина Николаевна** "Фотокаталитическая активность наночастиц TiO₂ и SiO₂ в реакциях термического разложения поликарбонатных нанокмпозитов"
42. **Гаврилов Владислав Константинович** "Новые P,S-бидентатные 1,3,2-диазафосфолидиновые лиганды в Pd-катализируемых реакциях аллильного замещения"
43. **Флид Виталий Рафаилович** "Каталитическое аллилирование производных норборнена и норборнадиена. Механизм процесса и методы управления направлением β-гидридного переноса в реакции"
44. **Жеглов Сергей Викторович** "Палладиевые каталитические системы на основе нового хирального P,S-бидентатного лиганда"
45. **Курочкин Артём Вячеславович** "Генезис структуры молибденсодержащих катализаторов в процессах крекинга пропана"
46. **Ростовщикова Татьяна Николаевна** "Селективное окисление CO на Pt- и Pt-Co/ZSM-5, полученных на основе ацетатных комплексов платины"
47. **Шилина Марина Ильинична** "Влияние добавки марганца на каталитическую активность систем Co/ZSM-5 в полном и селективном окислении CO"
48. **Рудь Екатерина Сергеевна** "Синтез и применение нового гидрофосфорана как протолиганда в Pd-катализируемом аллильном замещении"
49. **Трунина Валерия Михайловна** "Новый диамидофосфитный лиганд в Pd-катализируемых асимметрических превращениях"
50. **Фирсин Илья Дмитриевич** "Новый лиганд на основе TADDOL в Pd-катализируемых асимметрических превращениях"
51. **Чучелкин Илья Валерьевич** "Каталитические системы на основе 1,3,2-диазафосфолидинов с периферийными тиоэфирными фрагментами"
52. **Чистякова Полина Александровна** "Превращение обводненных растворов этанола в присутствии цеолитсодержащего Pd-Zn/MFI/Al₂O₃ катализатора"
53. **Шамсиев Равшан Сабитович** "Теоретическое моделирование влияния формы кластеров Pd₅₅ на механизм каталитической деоксигенации пропановой кислоты"
54. **Вассерман Любовь Александровна** "Термодинамические и структурные характеристики крахмалов, экстрагированных из почти-изогенных и замещенных линий пшениц"
55. **Иванов Дмитрий Сергеевич** "Структурно-динамические свойства асфальто-смолистых агрегатов по данным ¹H ЯМР релаксометрии и спектроскопии"
56. **Копнов Александр Юрьевич** "Новые нанокмпозиционные материалы типа "соль в пористой матрице" на основе мезоструктурированных полимерных матриц и хлорида кальция: синтез и свойства"

57. **Курбанбаева Арзигул Эркиновна** "Исследование комплексообразующих свойств линейных сополимеров"
58. **Маклакова Ирина Александровна** "Термоокисление СВМПЭ в композитах СВМПЭ/бор в зависимости от степени наполнения"
59. **Старчак Елена Евгеньевна** "Полимер-полимерные композиции на основе СВМПЭ, синтезированные в одностадийной полимеризации этилена в присутствии бинарной каталитической системы"
60. **Саид-Галиев Эрнест Ефимович** "Терполимеризация пропиленоксида, диоксида углерода и триметиленкарбоната в сверхкритическом диоксиде углерода"
61. **Загоскин Юрий Дмитриевич** "Высокопористые материалы на основе сополимеров полилактида и поликапролактона для малоинвазивной хирургии"
62. **Кузнецов Никита Михайлович** "Влияние природы наполнителя на свойства электроактивных эластомерных материалов на основе полидиметилсилоксана"
63. **Кузнецов Никита Михайлович** "Электрореологические жидкости, наполненные частицами полисахаридов: состав, структура, свойства"
64. **Кочервинский Валентин Николаевич** "О возможной причине асимметричного переключения спонтанной поляризации фторсодержащих сегнетоэлектрических полимеров, используемых в элементах памяти"

Вечерняя сессия

гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Корчак В.Н.

15.00 **Цодиков Марк Вениаминович** "Особенности превращения высокостабильных субстратов нефтяного и растительного происхождения в плазменно-каталитическом режиме, стимулированным микроволновым излучением"

15.40 **Чистяков Андрей Валерьевич** "Превращение оксигенатов в энергоносители и продукты нефтехимии в присутствии наноразмерных катализаторов"

16.20 **Федотов Алексей Станиславович** "Гибридный каталитический мембранный реактор на основе пористых керамических конвертеров для процессов получения водорода и ценных мономеров из органического сырья различного происхождения"

16.35 **Грачев Данил Юрьевич** "Дегидрирование кумола в α -метилстирол на пористых керамических каталитических Re-W- и Fe-Cr-содержащих конвертерах"

16.50 Перерыв

17.00 **Мельгунов Максим Сергеевич** "Использование машинного обучения в задачах исследования текстуры адсорбентов и катализаторов"

17.15 **Барабанов Артем Александрович** "Влияние стереорегулирующих доноров на число и реакционную способность активных центров с различной стереоспецифичностью при полимеризации пропилена на титан-магниевого катализаторах"

17.30 **Исупова Любовь Александровна** "Окислительная конденсация метана в присутствии перовскитоподобных титанатов стронция "

17.45 **Дмитрачков Алексей Михайлович** "Введение азота в состав поверхности оксида алюминия для повышения термической стабильности нанесенных наночастиц металлов"

18.00 **Шилов Владислав Александрович** "Композитный катализатор конверсии дизельного топлива в синтез-газ"

18.15 **Константинов Григорий Игоревич** "Пиролиз устойчивых субстратов в синтез-газ и углеводороды, под воздействием микроволнового излучения в присутствии наноразмерных кобальтсодержащих систем"

24 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Утренняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Флид В.Р.

9.00 **Ростовщикова Татьяна Николаевна** "Пути повышения эффективности наноструктурированных катализаторов (на примерах окисления CO и CH₄)"

9.40 **Таран Оксана Павловна** "Бифункциональные катализаторы для получения ценных химических продуктов из растительных полимеров"

9.55 **Васютин Павел Романович** "Синтез сложных оксидных катализаторов с использованием обработки предшественников в водных флюидах"

10.10 Перерыв

10.20 **Столяров Игорь Павлович** "Новый подход к синтезу ацетата платины(2+), ранее недоступного прекурсора для гомогенного и гетерогенного катализа"

10.35 **Голодухина Светлана Владимировна** "Сложные оксиды LnFe_{0.5}Sb_{1.5}O₆ в реакции окисления CO"

10.50 **Покочуева Екатерина Васильевна** "Карбиды родия и молибдена в реакциях гидрирования параводородом"

11.05 **Кононенко Елизавета Сергеевна** "Развитие методов МРТ визуализации реакторов гетерогенного каталитического гидрирования в газе с использованием параводорода"

11.20 **Связов Сергей Владимирович** "Изучение особенностей реакций гидрирования ненасыщенных углеводородов параводородом"

Вечерняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Ростовщикова Т.Н.

15.00 **Шмидт Александр Федорович** "Операндо кинетические исследования в установлении механизмов реакций кросс-сочетания с арилхлоридами"

15.20 **Гаврилов Константин Николаевич** "Доступные и модульные амидофосфито- и диамидофосфито-тиоэфирные хиральные лиганды в координации и металлокатализе"

15.40 **Кузнецов Борис Николаевич** "Гетерогенно-каталитические процессы конверсии древесной биомассы в ценные химические продукты"

15.55 **Севостьянова Надежда Тенгизовна** "Алкоксихарбонилирование ненасыщенных соединений: достижения последних десятилетий"

16.10 **Герман Дмитрий Юрьевич** "Сополимеризация бетулина с бутиллактаном: Влияние природы катализатора"

16.25 **Григорьева Анна Романовна** "Ag- и Au-катализаторы жидкофазного окисления бетулина: Различия и сходства в каталитических и физико-химических свойствах"

17.30 **Закрытие Симпозиума**

25 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Отъезд участников