

### Программа подсекции “Физическая химия-I”

Регламент устных докладов - до 10 мин, ответы на вопросы - до 5 мин.

Иллюстративный материал - мультимедийный проектор (презентации Power Point 2003 или pdf)

Требования к стендовому докладу – формат А1, книжная (вертикальная) ориентация.

<b>13 апреля, понедельник</b>		
<b>Устная сессия (10.20 – 19.00), химический факультет, ауд. 446</b>		
10.00-10.20	Копирование материалов презентаций с носителей на ноутбук	
10.20-10.30	<b>Открытие подсекции “Физическая химия-I”</b> Вступительное слово: председатель секции <b>А.В. Столяров</b>	
1	10.30-10.45	<b>Бокарев С.И.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Строение и динамика молекул дикарбонильных соединений в основном и низших возбужденных электронных состояниях
2	10.45-11.00	<b>Бокарева О.С.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Строение и динамика монометилпроизводных акролеина в основном и низших возбужденных состояниях
3	11.00-11.15	<b>Растольцева Е.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Строение и конформационная динамика молекулы метилциклопропилкетона в основном $S_0$ и возбужденных $T_1$ и $S_1$ электронных состояниях
4	11.15-11.30	<b>Калиман И.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Моделирование реакции образования сукцинимиды из остатков аспарагина – одной из важнейших реакций деградации белков
5	11.30-11.45	<b>Миронов В.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Моделирование фотофизических свойств разгорающегося флуоресцентного белка asFP595
6	11.45-12.00	<b>Морозов Д.И.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Моделирование реакции гидролиза сукцинилхолина в активном центре бутирилхолинэстеразы, а также её модификаций: Asp70Gly и Tyr128Cys методом КМ/ММ
7	12.00-12.15	<b>Павлов М.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> CASSCF расчеты электронных термов, порожденных локализованными состояниями в кластерных моделях нанотрубок (7,0)
8	12.15-12.30	<b>Селезнёв А.О.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Новый пропагаторный метод оценки характеристик переходов в электронных спектрах молекул с отрывом или налипанием электрона
12.30-14.00		<b>Перерыв</b>
9	14.00-14.15	<b>Зыков Т.Ю.</b> <i>Тверской Государственный Университет</i> О минимальном размере наночастиц металлов при спонтанной коалесценции.

10	14.15- 14.30	<b>Тулибаева Г.З.</b> <i>Институт проблем химической физики РАН</i> Исследование электрохимических процессов на межфазной границе Li/электролит с целью минимизации побочных реакций разложения растворителя в процессе эксплуатации литиевых источников тока
11	14.30- 14.45	<b>Гопин А.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Преобразование и концентрирование энергии ультразвукового поля на наночастицах в гелевых системах
12	14.45- 15.00	<b>Громов А.П.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Динамика сорбции воды на отдельном зерне адсорбента при скачкообразном изменении парциального давления пара
13	15.00- 15.15	<b>Гурский С.И.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Люминесцентные свойства солей аниона 3-циано-4-дициано-5-оксо-4,5-дигидро-1Н-пиррол-2-олата с однозарядными катионами ( $\text{Na}^+$ , $\text{K}^+$ , $\text{Rb}^+$ , $\text{Cs}^+$ и $\text{NH}_4^+$ )
14	15.15- 15.30	<b>Еленский А.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Мономолекулярные слои и ЛБ-пленки белков
15	15.30- 15.45	<b>Карзов И.М.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Взаимосвязь энергетических характеристик межфазных границ в системе «волокно-связующее» и прочностных свойств полимерных композиционных материалов
16	15.45- 16.00	<b>Мазина С.Е.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Гипотеза генезиса вторичного минерального образования «лунное молоко», выдвинутая на основе анализа морфологии кристаллов
17	16.00- 16.15	<b>Федосов Д.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Первапорационное разделение вода/спирт на мембранах с цеолитом NaA
18	16.15- 16.30	<b>Федотова О.С.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Новые электродные системы для регистрации биомолекул
16.30-17.00		<b>Перерыв</b>
19	17.00- 17.15	<b>Стрепетова Т.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Адсорбционные свойства силохрома и иммобилизованных на его поверхности наночастиц золота
20	17.15- 17.30	<b>Хрящикова Д.Н.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Обращенная газовая хроматография на Ag, иммобилизованном на $\text{SiO}_2$
21	17.30- 17.45	<b>Ковыршин А.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Моделирование процессов сорбции <i>n</i> -алканов и <i>n</i> -перфторалканов на поверхности перфторграфита.

22	17.45- 18.00	<b>Андрейченко Н.Н.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Неэмпирическое моделирование колебательных спектров изомеров муравьиной и пероксомуравьиной кислот с учетом изотопозамещения H→D
23	18.00- 18.15	<b>Дроздова А.Н.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Неадиабатическое описание спин-орбитального комплекса $D^1\Pi\sim d^3\Pi$ молекулы NaK вплоть до энергии диссоциации
24	18.15- 18.30	<b>Новичкова Д. А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Моделирование фотофизических свойств цианогидроксикумаринов
25	18.30- 18.45	<b>Мешков В.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Новый метод численного расчета длины рассеяния
26	18.45- 19.00	<b>Токарев К.Л.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Неэмпирический расчет энтальпии образования селенорганических соединений

**14 апреля, вторник****Устная сессия (14.00 – 19.00), химический факультет, ауд. 446**

13.30-14.00		Копирование материалов презентаций с носителей на ноутбук
27	14.00-14.15	<b>Бардина А.В.</b> <i>Ивановский государственный университет</i> Конформационные свойства <i>орто</i> -нитробензолсульфонилфторида (2-НБСФ)
28	14.15-14.30	<b>Жабанов Ю.А.</b> <i>Ивановский государственный химико-технологический университет</i> Строение металлокомплексов макрогетероциклического соединения АВВАВ-типа по данным квантово-химических расчетов
29	14.30-14.45	<b>Лобанова Н.Г.</b> <i>Институт проблем химической физики РАН</i> Квантово-химическое исследование строения биядерных кварцетиновых комплексов золота и их взаимодействия с метаном
30	14.45-15.00	<b>Ляпунова Д.И.</b> <i>Тверской государственный университет</i> Моделирование методом ланжевеновской динамики растяжения полимерной глобулы за концы цепи
31	15.00-15.15	<b>Пелевина Е.Д.</b> <i>Ивановский государственный университет</i> Электроннографическое исследование строения молекулы N,N'-этилен-бис(ацетилацетонимината) цинка (II), $ZnO_2N_2C_{12}H_{18}$
32	15.15-15.30	<b>Шишкина А.В.</b> <i>Российский химико-технологический университет</i> Особенности распределения электронной плотности и электростатического потенциала в ван-дер-ваальсовых кристаллах
33	15.30-15.45	<b>Герасимов А.В.</b> <i>Химический институт имени А.М. Бутлерова</i> Молекулярное распознавание паров органических соединений с помощью наноразмерных слоев фосфорорганических дендримеров
34	15.45-16.00	<b>Зеликова И.Г.</b> <i>Институт проблем комплексного освоения недр, Казахстан</i> Расчет плотности фононных состояний в смитсоните
35	16.00-16.15	<b>Низовцев А.С.</b> <i>Новосибирский государственный университет</i> Теоретическое исследование нового типа реакций замещения с участием молекулярного кислорода
36	16.15-16.30	<b>Птицына А.А.</b> <i>Институт органической химии УНЦ РАН</i> Димеризация нитрозооксидов на триплетной ППЭ.
37	16.30-16.45	<b>Семесько Д.Г.</b> <i>Башкирский государственный университет</i> Квантово-химическое и кинетическое моделирование механизма рекомбинации пероксильных радикалов
38	16.45-17.00	<b>Сержантова М.В.</b> <i>Сибирский Федеральный Университет</i> Квантово-химическое исследование процесса сорбции водорода нанокластерами магния, модифицированными атомами переходных металлов

39	17.00- 17.15	<b>Чабан В.В.</b> <i>Харьковский национальный университет</i> Перспективы использования растворов тетрафторобората тетраэтиламмония в ацетонитриле и углеродного нанопористого материала для улучшения эксплуатационных характеристик электрохимического двухслойного суперконденсатора
40	17.15- 17.30	<b>Юрина А.В.</b> <i>Институт органической и физической химии КазНЦ РАН</i> Агрегационное поведение, каталитическая активность и защитное антикоррозионное действие водных систем полиэлектролит - катионное поверхностно-активное вещество
19.00		<b>Подведение итогов работы подсекции “Физическая химия-1” Закрытие конференции</b>

<b>14 апреля</b>	
<b>Стендовая сессия (13.00-14.00), химический факультет, холл II-го этажа</b>	
12.00-13.00	Подготовка к стендовой сессии
1	<b>Банару А.М.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Водные мотивы в кристаллах органических полигидратов
2	<b>Белецкая А.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Миграция водорода по поверхности кластера золота в реакции каталитического синтеза пероксида водорода
3	<b>Гаджиев О.Б.</b> <i>Нижегородский государственный университет</i> Димеры NO <sub>2</sub> : пероксиды и бирадикалы
4	<b>Данилов Н.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Состояние коллагена в тканях глаза в норме и патологии
5	<b>Демидов Р.М.</b> <i>Казанский государственный университет</i> Изучение явления самоассоциации водородосвязанных жидкостей в различных растворителях методами ЯМР - и ИК-спектроскопии
6	<b>Емельянов К.Б.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Математическое моделирование процесса анодного интеркалирования графита в разбавленной азотной кислоте
7	<b>Константинова Н.М.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Определение коэффициентов активности хлорида натрия в водных растворах спиртов 1-C <sub>n</sub> H <sub>2n+1</sub> OH (n = 2,3,4) методом ЭДС
8	<b>Корякина В.В.</b> <i>Институт проблем нефти и газа СО РАН</i> Получение водородсодержащей газовой смеси при механодеструкции гидратов природного газа
9	<b>Лапыкина Е.А.</b> <i>Ивановский государственный университет</i> Структура и энергетика молекул трийодидов лантаноидов
10	<b>Медведева Ю.С.</b> <i>Ивановский государственный университет</i> Геометрическое и электронное строение газофазных молекул N,N'-этилен-бис(ацетилацетониминатов) никеля(II) и меди(II), MO <sub>2</sub> N <sub>2</sub> C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>
11	<b>Мухамедзянова Д.Ф.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Топология поверхности потенциальной энергии системы аллилбензол – кластер золота
12	<b>Овсянников Р.А.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Синтетические мезо-макропористые силикаты как носители для иммобилизации ферментов
13	<b>Ошкин И.В.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Моделирование изомеризации и внутримолекулярной циклизации стирилхинолинов
14	<b>Поломских В.С.</b> <i>химический факультет МГУ</i> Неэмпирическое моделирование комплексов HCHO·CF <sub>4</sub> и CH <sub>3</sub> OH·CF <sub>4</sub>
15	<b>Ситин А.Г.</b> <i>Российский химико-технологический университет</i> Комплексообразующие и фотохимические свойства производных 2-стирилтиофена
16	<b>Тарасов А.В.</b> <i>Институт общей и неорганической химии им. Курнакова РАН</i> Кинетика процесса взаимодействия фторполимеров с переходными металлами на примере металлического вольфрама
17	<b>Шестаков А.М.</b> <i>Московская государственная академия тонкой химической технологии</i> Коллоидно-химические свойства солей азолов, полученных из пальмового масла

