

ТУАПСЕ 2013

Современная химическая физика

XXV конференция



сборник
тезисов

20 сентября–1 октября, 2013 года
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

УВАЖАЕМЫЕ УЧАСТНИКИ XXV КОНФЕРЕНЦИИ «СОВРЕМЕННАЯ ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»!

В двадцать пятый раз мы собираемся на Конференции для того, чтобы обменяться научными новостями и узнать о новых достижениях коллег. Под эгидой Конференции из года в год мы стремимся объединить как можно больше специалистов по нанотехнологиям и профессионалов из смежных областей. Отраднo, что на научных мероприятиях становится все больше молодежи. Студенты, аспиранты и молодые ученые из разных городов России и ближнего зарубежья приезжают на Конференцию с устными и стендовыми докладами, они также очень активно участвуют во всех программных мероприятиях. Приятно осознавать, что у Конференции есть постоянные участники, без которых не обходится ни одно мероприятие. Они вносят большой вклад в развитие научных дискуссий, и, мы надеемся, продолжат эту добрую традицию и в будущем.

Спасибо всем, кто принял участие в юбилейной XXV конференции «Современная химическая физика»!

Желаем вам творческих и профессиональных успехов в следующем году!

Оргкомитет

ОРГАНИЗАТОРЫ:

Президиум Российской академии наук

Отделение химии и наук о материалах РАН

Российский фонд фундаментальных исследований

Федеральное государственное бюджетное учреждение

науки Институт химической физики им.

Н.Н.Семенова Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение

науки Институт проблем химической физики

Российской академии наук

Федеральное государственное бюджетное учреждение

науки Центр фотохимии Российской академии наук

Московский государственный университет имени

М.В.Ломоносова

НП «Центр диагностики наноструктур и

наноматериалов»

ОРГКОМИТЕТ

Председатель, Директор

проф. Шуб Б.Р

Председатель программного комитета.

акад Бучаченко А.Л.

Члены оргкомитета

акад. Алдошин С.М.
акад. Алфимов М.В.
акад. Берлин А.А.
чл.-корр. Гехман А.Е.
проф. Корчак В.Н.
проф. Мельников М.Я.
акад. Музафаров А.М.
проф. Немухин А.В.
чл.-корр. Озерин А.Н.
акад. Пармон В.Н.
проф. Плахутин Б.Н.
проф. Товбин Ю.К.
проф. Трахтенберг Л.И.
акад. Цветков Ю.Д.
проф. Цодиков М.В.

Уч. секретарь

Озерин С.А.

Уч. секретариат

Гатин А.К.
Кирсанкин А.А.
Костров А.Н.
Куркин Т.С.
Шарова М.В.

Конкурсная комиссия

акад. Бучаченко А.Л.
проф. Корчак В.Н.
чл.-корр. Озерин А.Н.
проф. Трахтенберг Л.И.
проф. Товбин Ю.К.
проф. Уманский С.Я.
акад. Цветков Ю.Д.
проф. Цодиков М.В.
проф. Шуб Б.Р.
Озерин С.А.

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

20 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

Заезд участников. Регистрация.

21 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Утренняя сессия

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

10.00 Открытие Конференции

10.30 **Озерин Александр Никифорович** «Наночастицы в полимерной матрице. Идеальные схемы и реальная действительность»

11.10 **Бучаченко Анатолий Леонидович** «Магнитный контроль синтеза ДНК»

Вечерняя сессия

Биохимическая физика

Ведущий: акад. Бучаченко А.Л.

16.00 **Немухин Александр Владимирович** «Достижения и проблемы компьютерного моделирования свойств макромолекул»

16.40 **Голованов Денис Геннадьевич** «Современное аналитическое оборудование фирмы Bruker»

16.55 **Хренова Мария Григорьевна** «Моделирование механизма протеолиза в матричных металлопротеиназах»

17.10 **Легута Ульяна Григорьевна** «Биологические эффекты магнитных изотопов ^{25}Mg и ^{67}Zn в бактериях *E.coli*»

17.25 **Проскуряков Иван Игоревич** «Синглет-триплетное деление возбуждения в светособирающих комплексах пурпурных бактерий»

20.00 Фуршет

22 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Шуб Б.Р.

9.00 **Трахтенберг Леонид Израилевич** «Химические сенсоры на основе поликристаллических пленок смешанных наноструктурированных металлоксидов»

9.40 **Кожевин Владимир Михайлович** «Зарядовое состояние плотных наноструктур аморфных металлов и их каталитическая активность»

10.10 **Павловец Георгий Яковлевич** «Особенности диагностики реакционноактивных наноразмерных компонентов энергоёмких композитов»

10.30 **Кожушнер Мортко Аврумович** «Изменение заряда на адсорбированной молекуле в СТМ»

10.50 **Гришин Максим Вячеславович** «Адсорбционные свойства металлических наночастиц»

11.05 Перерыв

11.15 **Бричкин Сергей Борисович** «Особенности получения, свойства и перспективы применения экологически безвредных квантовых точек фосфида индия»

11.30 **Юхин Юрий Михайлович** «Экстракционно-полиольный метод получения нанопорошков металлов и их сплавов»

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Трахтенберг Л.И.

16.00 **Гордон Евгений Борисович** «Влияние сверхтекучести на процессы переноса в жидком гелии»

16.40 **Лебедев Николай Геннадьевич** «Хиральный эффект адсорбции атомарного и молекулярного кислорода на поверхности углеродных нанотрубок»

16.55 Перерыв

17.05 **Антипов Анатолий Евгеньевич** «Диффузия в квазиодномерных периодических структурах»

17.20 **Гатин Андрей Константинович** «Взаимодействие кислорода с водородом на поверхности единичной наночастицы золота»

17.35 **Воробьев Александр Юрьевич** «Возможности исследования ловушечных состояний в запрещенной зоне полимера методом измерения вольт-амперных характеристик в термодинамически неравновесных условиях»

17.50 **Ермолина Елена Геннадьевна** «Дийодзамещенный бордипирролилметен как агент оптической сенсорики кислорода»

18.05 **Маковийчук Мирослав Иванович** «Фликкер-шумовая газовая сенсорика»

18.20 **Абасов Сафа Ислам** «Влияние размера частиц платины на её хемосорбционные и каталитические свойства»

23 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 1 (нанохимия, нанофизика и нанотехнологии, нанобиология биохимическая физика)

1. Авдеева Елена Ивановна «Магнитно-полевые эффекты изотопа цинка ^{67}Zn и магния ^{25}Mg в бактериальных клетках»

1. Андреев Сергей Михайлович «Простой путь получения водных нанодисперсий фуллерена»

2. Ахметзянова Ульяна Роммельевна «Наноструктурированный полимерный Ru-содержащий катализатор жидкофазного гидрирования D-мальтозы»

3. Башкатова Елена Николаевна «Фуллерен и его производные подавляют реакцию гиперчувствительности замедленного типа»

4. **Бекетова Дарья Игоревна** «Исследование механизма кристаллизации нитрата калия из обратномилллярных растворов Tergitol NP-4 и АОТ»
5. **Борознин Сергей Владимирович** «Исследование интеркалирования боросодержащих нанотруб атомами металлов»
6. **Борознин Сергей Владимирович** «Особенности строения и физико-химических свойств бороуглеродных нанотруб типа «кресло»»
7. **Буданов Борис Андреевич** «Сканирующая туннельная микроскопия и резонансная туннельная спектроскопия декамолибдодикобальтатовых анионов»
8. **Вершинников Владимир Иванович** «Самораспространяющийся высокотемпературный синтез силицида магния»
9. **Вдовиченко Артем Юрьевич** «Проводимость и фотопроводимость на переменном токе нанокмползитов железо – полипараксилилен»
10. **Волков Владимир Тимофеевич** «Гибридный материал углеродные нанотрубки - графен: синтез и использование для датчиков Холла»
11. **Гак Владимир Юрьевич** «Изучение процесса фёрстеровского переноса энергии в агрегатах наночастиц в растворах»
12. **Голощанов Дмитрий Леонидович** «Исследование диэлектрических свойств нанокристаллического карбонат-замещенного гидроксилпатита кальция»
13. **Гребенчиков Юрий Борисович** «Исследование экранирующих свойств рулонного магнитного материала»
14. **Дохликова Надежда Владимировна** «Адсорбция водорода на единичных наночастицах никеля»
15. **Жеглова Татьяна Владимировна** «Изучение токсического действия наноматериалов по биохимическим показателям растений»
16. **Жильцова Елена Петровна** «Агрегационные свойства систем на основе сульфонатного каликс[4]резорцинарена с моно- ди- и тетракаатионными ПАВ»
17. **Жилиева Елена Ивановна** «Влияние растворителя на свойства органических проводников на основе BEDT-TTF с анионами $[MvBr_4]^{2-}$ »
18. **Завьялов Сергей Алексеевич** «Зависимость электрофизических свойств пленок ППК+CdS от концентрации наночастиц»
19. **Завьялов Сергей Алексеевич** «Концентрационная зависимость сопротивления пленок поли-n-ксилилена с добавками наночастиц»
20. **Закоржевский Владимир Вячеславович** «Самораспространяющийся высокотемпературный синтез наноструктурированного порошка нитрида титана»
21. **Зюзюкина Елена Николаевна** «Изучение стадийности образования наноразмерных систем Fe-Co»
22. **Иванцов Михаил Иванович** «Магнитный нанокмползит на основе Co и ИК-пиролизованного полифеноксазина»
23. **Калинина Ирина Георгиевна** «Кинетический метод оценки микробиологической активности наноструктурных частиц серебра»
24. **Кирсанкин Андрей Александрович** «Электронные ловушки в наноструктурированных оксидах олова и цинка»
25. **Колесников Денис Владимирович** «Проводимость углеродных нанотрубок в приближении Дирака»
26. **Полунина Александра Анатольевна** «Распространение предельно коротких импульсов в кремниевых нанотрубках»
27. **Коробов Александр Исаакович** «Два способа построения разбиений Пуассона-Вороного: тождественность в случае Евклидовой метрики и различия в случае неевклидовых метрик»
28. **Королев Дмитрий Владимирович** «Исследование возможности применения наночастиц органокремнезема для адресной доставки лекарственных препаратов»

29. **Корчагин Денис Владимирович** «Внутренняя магнитная анизотропия в бромсодержащих комплексах Co(II) »
30. **Крутояров Алексей Андреевич** «Исследование взаимодействия углеродных нанотрубок и наиболее часто используемых полимеров»
31. **Куприянов Леонид Юрьевич** «Прыжковая проводимость в тонких пленках на основе нанокompозита металл – полимер»
32. **Лезова Александра Андреевна** «Тепловые эффекты при бинарной конденсации паров в закритическую каплю»
33. **Леньшин Александр Сергеевич** «Формирование пористого кремния с различным размером пор и его оптические характеристики»
34. **Лукашенко Светлана Сергеевна** «Особенности агрегационного поведения катионного поверхностно-активного вещества в биологических средах»
35. **Лукашенко Светлана Сергеевна** «Агрегационные свойства водных растворов каликс[4]резорцинов, содержащих N-метил-D-глюкаминовые фрагменты»
36. **Максименко Ольга Олеговна** «Изучение комплексообразования в системе рифабутин - гидроксипропил-бета-циклодекстрин»
37. **Маркова Екатерина Борисовна** «Влияние атмосферы водорода на структуру смешанных наносистем»
38. **Мишина Ольга Александровна** «Влияние растворов низких концентраций биорегулятора активности микроорганизмов на самоорганизацию и физико-химические свойства питательной среды RPMI-1640»
39. **Невзорова Юлия Владимировна** «Влияние внешнего постоянного магнитного поля на удельную проводимость однослойной углеродной нанотрубки»
40. **Озерин Сергей Александрович** «Структура и сдвиг Стокса в нанокompозитах поли-пара-ксилилен – PbS»
41. **Поповецкий Павел Сергеевич** «Исследование структуры двойного электрического слоя наночастиц серебра в растворах АОТ методом неводного электрофореза»
42. **Прокофьев Сергей Ильич** «Тепловое движение двух включений жидкого свинца, связанных одной дислокацией в алюминиевой матрице»
43. **Прусаков Валерий Евгеньевич** «Микроструктура и сенсорные свойства нанокристаллических ферритов $\text{Zn}_{(1-x)}\text{Fe}_{(1+x)}\text{O}_4$ »
44. **Румянцев Борис Михайлович** «Влияние магнитных наночастиц на магнитные спиновые эффекты в фотопроцессах (люминесценция и фотопроводимость) в полимерных композитах полиалканэфиримидах с рубреном»
45. **Скомаровский Владимир Станиславович** «Высокочувствительный магнитометр на основе эффекта гигантского магнитного импеданса в аморфных ферромагнитных микропроводах»
46. **Смирнов Константин Львович** «Получение высокопористой пенокерамики с наноразмерной структурой в процессе СВС»
47. **Тимошева Алина Петровна** «Биомиметическая каталитическая активность систем на основе бромиды цетилтриметиламмония и п-сульфонатокаликс[6]арена в области низких концентраций компонентов»
48. **Уваров Валерий Иванович** «Формирования каталитически активных мембран с восстановительной стадией в процессах СВС»
49. **Харламов Владимир Федорович** «Изменение под действием активного газа термоэлектронных свойств материала, состоящего из шарообразных наночастиц»
50. **Чмерева Татьяна Михайловна** «Влияние десорбции молекул кислорода на кинетику замедленной флуоресценции красителей в нанопорах»
51. **Чурилов Геннадий Иванович** «Получение нанокompозитов полисахаридов лекарственных растений и нанометаллов»
52. **Штейнман Эдуард Александрович** «Особенности фотолюминесценции пленок карбида кремния»

- 53. Клецов Алексей Александрович** «Расчет проводимости фрагментов ДНК методом электронного пропагатора»
- 54. Харитонов Василий Анатольевич** «Борорганические наночастицы: размеры, форма, электронное строение и химические свойства на примере взаимодействия с аммиаком»
- 55. Таланцев Артем Дмитриевич** «Ферромагнетизм нанокластеров сплавов хрома и гашение фотолюминесценции в гетероструктурах ZnSe/ZnMgSSe/ZnSSe:Cr»
- 56. Бакулин Александр Викторович** «Изучение процессов абсорбции и диффузии в сплаве TiFe»
- 57. Бибиков Сергей Борисович** «Электрофизические и физико-химические свойства композиционных материалов с модифицированными ферритовыми наполнителями»
- 58. Бычкова Анна Владимировна** «Белковые покрытия на магнитных наночастицах: создание и новые подходы к исследованию функциональных свойств»
- 59. Вилькеева Динара Эльдаровна** «Исследование механизма взаимодействия однослойных углеродных нанотрубок типа zig-zag, модифицированных карбоксильной группой, и атомов щелочных металлов»
- 60. Зицерман Владимир Юрьевич** «Наноматериалы для энергетики. Систематизация физико-химических характеристик и разработка базы данных»
- 61. Ивичева Светлана Николаевна** «"Химическая сборка" слоистых фаз титаната висмута и дититаната висмута со структурой пирохлора в порошках и упорядоченных 3D нанокompозитах»
- 62. Ивичева Светлана Николаевна** «Влияние анионов стабилизирующих золи при синтезе порошков, функциональных покрытий на основе высокодисперсного диоксида титана и 3D-нанокompозитов на основе SiO₂/TiO₂»
- 63. Матюшенко Владимир Игоревич** «Метастабильность металлических микронных сфер, образующихся при импульсной лазерной абляции в сверхтекучем гелии»
- 64. Никитина Людмила Владимировна** «Влияние наноразмерных частиц диоксида кремния на физико-механические свойства термопластичного полимера»
- 65. Алиджанова Ннара Эскендеровна** «Морфологические особенности клеток E. coli при воздействии водорастворимых эндометаллофуллеренов»
- 66. Володина Людмила Андреевна** «Изменение сигнала ЭПР нитрозильных комплексов гемоглобина в ране при действии наночастиц меди»
- 67. Вассерман Любовь Александровна** «Структурные особенности крахмалов, экстрагированных из микроклубней трансгенного картофеля, в зависимости от условий освещенности растений»
- 68. Градова Маргарита Алексеевна** «Роль межмолекулярных взаимодействий в регуляции пероксидазной активности гема в микрогетерогенных средах»
- 69. Муханова Айгуль Флуровна** «Динамическая флуориметрия как метод диагностики патогенных тканей»
- 70. Эренбург Симон Борисович** «Структурные и электронные параметры нанозолота в кукурбитуриле по экспериментальным и расчетным XERFD XANES- спектрам»
- 71. Эренбург Симон Борисович** «Микроструктура GeSi квантовых колец по данным EXAFS- спектроскопии»

Вечерняя сессия

нанохимия, нанофизика и нанотехнологии

Ведущий: проф. Гордон Е.Б.

15.30. **Аветисов Владик Аванесович** «Нано-машины: что это такое и как их делать»

16.10 **Харламов Владимир Федорович** «Влияние состояния поверхности шарообразных частиц на термоэлектрическую эффективность материала, состоящего из этих частиц»

16.25 **Чайкина Юлия Александровна** «Случайная наноструктура и нанодинамика сверхкритического CO₂»

16.40 **Лебедева Ольга Сергеевна** «Пьезорезистивные эффекты в углеродных наночастицах»

16.55 Перерыв

17.05 **Запорожец Марина Андреевна** «Композиционные материалы на основе наночастиц ZnO»

17.20 **Боровков Николай Юрьевич** «Структура бинарной пленки аминифталоцианин - фуллерен (1:2)»

17.35 **Баковец Владимир Викторович** «Размерные эффекты и кристаллохимические перестройки наноструктурированного люминофора Y₂O₃:Eu»

17.50 **Костров Андрей Николаевич** «Эволюция плазмонного резонанса наночастиц золота при воздействии мощных фемтосекундных лазерных импульсов»

24 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК

Утренняя сессия

Кинетика и динамика химических реакций, элементарные процессы

Ведущий: проф. Уманский С.Я.

9.00 **Товбин Юрий Константинович** «Молекулярно-кинетическая теория процессов переноса в разных фазах при нарушении условия локального равновесия»

9.40. **Арутюнов Владимир Сергеевич** «Парциальное окисление легких алканов как основа нового поколения газохимических процессов»

10.10 **Капралова Галина Александровна** «Новый способ переработки газовых углеводородов»

10.25 **Красильников Михаил Борисович** «Поляризация угловых моментов двухатомных молекул в бимолекулярных столкновениях»

10.40 **Первов Владислав Серафимович** «Прогнозирование "состав-структура-функциональные свойства" электрокерамических материалов с использованием методов химической информатики»

10.55 Перерыв

11.05 **Орлов Юрий Дмитриевич** «Современное состояние термохимии органических свободных радикалов»

11.20 **Рогозина Марина Викторовна** «Динамика разделения зарядов из второго возбужденного состояния и последующей рекомбинации в производных цинк-порфирина»

11.35 **Хвостенко Ольга Григорьевна** «Электронное строение отрицательных молекулярных ионов тетрацианохинодимерана (TCNQ)»

11.50 **Киракосян Хачатур Апетович** «К основам химической физики элементарных частиц»

12.05 **Михайлов Александр Валерьевич** «Анализ краевых условий формирования ударных волн на физических границах системы "поток излучения (лазер) - оптическая»

мембрана (подложка) - КЭМ - жесткий упор". Исследование ударно-волнового и напряженно-деф»

12.20 **Багрянский Виктор Андреевич** «Как спиновые триады могут прояснить вопрос о форме основного уравнения спиновой химии?»

12.35 **Гончаров Тельман Константинович** «Конформационные переходы в CL-20 (2,4,6,8,10,12-гексанитро- 2,4,6,8,10,12- гексаазаизовюрцитане)»

Вечерняя сессия

Высокомолекулярные соединения

Ведущий: член-корр. Озерин А.Н.

15.30 **Твердислов Всеволод Александрович** «Хиральность как физико-химическая основа стратификации в иерархиях природных молекулярных систем»

15.50 **Озерин Сергей Александрович** «Структура и свойства нанокмполитов никель/поли-п-ксилилен, синтезированных методом полимеризации из газовой фазы»

16.05 **Щербина Максим Анатольевич** «Тонкопленочные материалы на основе тиофенсодержащих кремнийорганических макромолекулярных систем для органической электроники»

16.20 **Щербина Максим Анатольевич** «Сравнительный анализ фазового поведения жестких секторообразных дендронов различной природы и функциональности»

16.35 **Тенчурин Тимур Хасянович** «Углеродные нанокмпозиционные волокнистые материалы на основе ПАН-прекурсоров полученных методом электроспиннинга. Структура и свойства»

16.50 **Якунин Андрей Николаевич** «Развитие когнитивных технологий в исследовании процессов самоорганизации супрамолекулярных и диссипативных полимерных наноструктур под воздействием внешних полей различной природы»

17.05 Перерыв

17.15 **Куркин Тихон Сергеевич** «Эффект усиления адгезионного контакта между полимерным волокном и эпоксидным связующим при их одновременной модификации наноалмазной шихтой»

17.30 **Багрянская Ирина Юрьевна** «Олигомерные аналоги полимерного нитрида серы (SN)_x - молекулярного металла и сверхпроводника»

17.45 **Курочкин Сергей Александрович** «Ухудшение термодинамического качества растворителя как метод получения разветвленных полимеров с повышенным содержанием высокоразветвленных макромолекул»

18.00 **Яцкевич Екатерина Игоревна** «Полифункциональные супрамолекулярные системы с гидроксильным фрагментом в головной группе»

18.15 **Тикунова Екатерина Петровна** «Влияние детонационной алмазной шихты на процесс отверждения эпоксидного связующего»

18.30 **Озерин Александр Сергеевич** «Закономерности образования и роста заряженных неорганических частиц в присутствии полиэлектролитов различной природы»

25 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 2 (Высокомолекулярные соединения, квантовая химия)

- 1. Аминова Роза Мухаметовна** «Квантово-химическое моделирование структуры молекулярных комплексов фрагментов коллагена с ионами кальция Ca^{2+} гидроксиапатита»
- 2. Белоусов Сергей Иванович** «Влияния малых добавок ионных жидкостей и ПАВ при электроформовании волокнистых материалов из расплава полимера»
- 3. Беляев Сергей Николаевич** «Свойства и структура кластеров $\text{Mg}_2\text{-Mg}_{31}$. Их взаимодействие с EtVg в вакууме»
- 4. Береговая Ирина Владимировна** «Поверхность потенциальной энергии и мономолекулярный распад анион-радикала пентафторанилина»
- 5. Громов Олег Игоревич** «Строение и реакционная способность хлороорганокупратов(II)»
- 6. Давлетова Олеся Александровна** «Исследования процесса гидрогенизации углеродного нанокристаллического материала на основе пиролизованного полиакрилонитрила»
- 7. Давлетова Олеся Александровна** «Построение геометрической модели нанополимерного материала на основе пиролизованного полиакрилонитрила»
- 8. Демидов Юрий Андреевич** «Особенности химических свойств сверхтяжелых элементов»
- 9. Дмитриков Петр Владимирович** «Механизм полимеризации параксилена»
- 10. Долин Сергей Петрович** «Квантовохимическое моделирование реакций окисления ряда органических субстратов надкарбоновыми кислотами»
- 11. Долин Сергей Петрович** «Интегральные вибронные константы в микроскопической теории водородно-связанных сегнетоэлектрических материалов»
- 12. Заика Юлия Владимировна** «Устойчивость безметалльных три- и тетрамолекулярных комплексов в составе атмосферы Земли»
- 13. Захаров Иван Иванович** «Структура кластеров воды $(\text{H}_2\text{O})^{6-}$ и аммиака $(\text{NH}_3)^{13-}$ с избыточным электроном. Квантово-химические исследования»
- 14. Захаров Иван Иванович** «Квантово-химические DFT-расчеты локальной структуры гидратированного электрона»
- 15. Зубанова Екатерина Михайловна** «Механизмы взаимодействия хлоридных комплексов меди с органическими радикалами»
- 16. Иванов Павел Леонидович** «Получение препарата на основе гиалуроновой кислоты, модифицированной аскорбиновой кислотой, для внутрисуставного инъекционного применения»
- 17. Каюмов Руслан Рифатович** «Влияние неорганических кислот на проводимость мембран Нафион115»
- 18. Кленина Ирина Борисовна** «Плёнки изолированных каротиноидов: синглет-триплетное деление возбуждения»
- 19. Ковальчукова Ольга Владимировна** «Электронодонорная способность полиоксосоединений карбоциклических и гетероциклических рядов в реакциях комплексообразования»
- 20. Козлова Светлана Геннадьевна** «Электронная плотность и полиморфные переходы в слоистых халькогенидах переходных металлов»

21. **Королев Владимир Юрьевич** «Квантово-химический расчет теплоты адсорбции молекул водорода палладием»
22. **Кудашов Александр Дмитриевич** «К поиску эффектов нарушения пространственной четности в молекуле RaF»
23. **Курочкин Сергей Александрович** «Три метода определения константы передачи цепи при радикальной ОПЦ-полимеризации стирола»
24. **Марков Александр Александрович** «Механизм передачи кислорода от комплексов V^V с O_2^{2-} и O_3^{2-} лигандами»
25. **Мещанкина Марина Юрьевна** «Биоразлагаемые поликомпонентные системы на основе полилактида и полиамида-6»
26. **Перов Николай Сергеевич** «Влияние топологических ограничений на температурное положение релаксационных переходов полигетероариленов»
27. **Румянцев Борис Михайлович** «Получение и исследование темновых и фотоэлектрических характеристик полимерных композитов с магнитными наночастицами»
28. **Савостина Людмила Ивановна** «Изучение структуры и свойств [4Fe4S] кластера металлопротеина методом DFT»
29. **Старчак Елена Евгеньевна** «Особенности морфологии и физико-механических свойств реакторных смесей на основе ПЭВП и сополимеров этилена с гексенем-1»
30. **Стовбун Сергей Витальевич** «Пороговые эффекты при образовании струн»
31. **Танатаров Азамат Тюлюгенович** «Квантово-химическое исследование устойчивости би-, три-, тетрамолекулярных комплексов Cu с молекулами N_2 , O_2 , H_2O в газовой фазе»
32. **Устинова Елена Александровна** «Квантово-химическое моделирование оксида меди(II)»
33. **Федотов Роман Николаевич** «Самореакция ООН радикалов с образованием синглетного кислорода $O_2(1\Delta g)$ »
34. **Хренова Мария Григорьевна** «Моделирование механизма фотореакции во флавин-содержащих белках рецепторах синего света»
35. **Шапошникова Вера Владимировна** «Синтез статистических кардовых сополиариленэфиркетонов на основе фталидсодержащего дифторпроизводного»
36. **Яцкевич Екатерина Игоревна** «Влияние электролитов на мицеллообразующие свойства морфолиниевых ПАВ»
37. **Алиев Михаил Алахвердиевич** «Микрофазное расслоение в полидисперсных мультимикроблокополимерах, образованных жесткими и гибкими блоками»
38. **Аржакова Ольга Владимировна** «Особенности деформирования и структура синтетических волокон на основе стеклообразного ПЭТФ в присутствии физически активных сред по механизму классического крейзинга»
39. **Березин Андрей Сергеевич** «Свойства растворов целлюлозы в бинарных системах MgММО - апротонный растворитель»
40. **Бузин Михаил Игоревич** «Твердофазный синтез полиметилденфталата»
41. **Вассерман Любовь Александровна** «Особенности структурирования в водных растворах полидифениленсульфоталата»
42. **Вольева Виолетта Борисовна** «Индикаторные свойства гибридов олигомерных полиэтиленгликолей с пространственно-затрудненными фенолами»
43. **Долгова Алла Анатольевна** «Получение и оптимизация сенсорных характеристик нового типа наноконпозиционных фоточувствительных материалов на основе нанопористых полимерных матриц, полученных при деформировании пленок ПЭВП по механизму крейзинга»
44. **Монахова Татьяна Вадимовна** «Термоокисление наноконпозитов на основе изотактического полипропилена и графита»

- 45. Ришина Лаура Абрамовна** «Синтез полимеров линейных высших альфа - олефинов на модифицированном катализаторе Циглера»
- 46. Скачкова Вера Константиновна** «Термические свойства продуктов взаимодействия силикатов натрия с декагидро-клозо-декаборатом триэтиламония»
- 47. Чернышова Екатерина Борисовна** «Модификация хитозана диальдегидом целлюлозы»
- 48. Шишлов Николай Михайлович** «Парамагнитные продукты термоллиза полидифениленсульфоталида»
- 49. Яблоков Михаил Юрьевич** «Экспериментальное определение толщины модифицированного слоя пленки ПТФЭ при воздействии тлеющего разряда»
- 50. Яблоков Михаил Юрьевич** «Воздействие тлеющего разряда постоянного тока на свойства и структуру поверхности пленки сополимера тетрафторэтилена с винилиденфторидом»
- 51. Витковская Надежда Моисеевна** «Квантовохимическое моделирование реакций этилирования и винилирования ацетона фенилацетиленом с участием KOH-5DMSO»
- 52. Витковская Надежда Моисеевна** «Квантово-химическое исследование механизма реакции нуклеофильного присоединения метантиола к ацетилену, проп-1-ину, бут-2-ину, этинилбензолу, 1,4-диэтинилбензолу в суперосновной среде KOH/DMSO»
- 53. Краснов Павел Олегович** «Возможные формы 2D и 3D кристаллов донорно-акцепторных диад порфирина с фуллереном C₆₀, несвязанных ковалентно»
- 54. Ларионова Елена Юрьевна** «Сравнительное квантовохимическое исследование термодинамики реакций: образования ацетиленовых спиртов и 7-метилен-6,8-диоксабицикло[3.2.1]октанов»
- 55. Ларионова Елена Юрьевна** «Квантовохимическое исследование конформационного строения 2,3,4-триметил-7-метилен-1,5-ди(тиофен-2-ил)-6,8-диоксабицикло[3.2.1]октана»
- 56. Охупкин Андрей Игоревич** «Образование силиламидных комплексов молибдена в присутствии ацетонитрила и фенилсилана. Квантово-химическое исследование»
- 57. Туровцев Владимир Владимирович** «Построение феноменологических моделей расчета термодинамических свойств веществ на основе электронного строения»
- 58. Морозов Вадим Андреевич** «Априорное определение узловых поверхностей пробных многоэлектронных волновых функций при использовании приближения Хартри-Фока и метода МВФ»
- 59. Якушко Егор Владимирович** «Исследование процесса формирования наночастиц никеля в составе нанокompозита Ni/C»
- 60. Боженко Константин Викторович** «Теоретическое исследование обменных взаимодействий в магнитной подрешетке бифункциональных соединений»
- 61. Евтушенко Юрий Михайлович** «Огнезащитное покрытие стабилизированное стеклянным порошком»
- 62. Евтушенко Юрий Михайлович** «Модифицирование эпокси-ангидридного компаунда наноорганобентонитом»
- 63. Куркин Тихон Сергеевич** «Влияние бисульфата калия на структурно-механические превращения поливинилспиртового волокна в процессе термообработки»

Вечерняя сессия

Квантовая химия

Ведущий: проф. Немухин А.В.

15.00. **Плахутин Борис Николаевич** «Каноническая форма молекулярных орбиталей в системах с открытыми электронными оболочками»

15.40 **Яржемский Виктор Георгиевич** «Электронное строение и функциональные свойства наночастиц золота»

15.55 **Козлова Светлана Геннадьевна** «Ароматичность и магнитные свойства металлокластеров переходных элементов»

16.10 **Титов Анатолий Владимирович** «Новый подход к описанию "состояния атома в соединении": применение к исследованию сверхтонкой структуры, химических сдвигов и других свойств молекул и твердых тел»

16.25 **Скрипников Леонид Владимирович** «Метод вычисления основных свойств в твёрдых телах»

16.40 **Новосадов Борис Константинович** «О физической природе слоистого строения многоэлектронного атома»

16.55 Перерыв

17.00 **Ломачук Юрий Вячеславович** «Метод описания химических сдвигов рентгеновских эмиссионных спектров молекул и твердых тел»

17.10. **Петров Александр Николаевич** «Анализ сверхтонкой структуры для оценки погрешности расчета Р,Т-нечетных эффектов в двухатомных молекулах»

17.20 **Зайцевский Андрей Вениаминович** «Высшие оксиды и пероксиды трансурановых элементов: моделирование молекул из первых принципов»

17.35 **Казаева Анна Николаевна** «Теоретическое исследование оксидантной активности метилрезорцина и его феноксильного радикала»

17.50 **Коновалова Елена Александровна** «Расчёт электронной структуры низколежащих состояний ионов с двумя валентными электронами»

18.05 **Игнатов Станислав Константинович** «Адсорбция глиоксаля и продуктов его УФ фотолиза на атмосферных наночастицах водного льда»

18.20 **Поляков Игорь Вадимович** «Моделирование структуры и спектров красного флуоресцентного белка с помощью комбинированного метода квантовой и молекулярной механики»

18.35 **Рыжиков Максим Раисович** «Топологический анализ взаимодействий Те-Те в кластерах с ядром Mo_3Te_6Q (Q=O, S, Se, Te)»

26 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ

Утренняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ

Ведущий: проф. Корчак В.Н.

9.00 **Рыжкина Ирина Сергеевна** «Эффект ультранизких концентраций и электромагнитных полей: новые факты и гипотезы»

9.30 **Ковтунов Кирилл Викторович** «Наноразмерные гетерогенные катализаторы как новый ресурс индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ)»

9.50 **Цодиков Марк Вениаминович** «Наноразмерные поляядерные металлооксидные катализаторы на основе слоистого вермикулита в переработке природного газа. Структура и каталитическая активность»

10.10 **Куликова Майя Валерьевна** «Синтез Фишера-Тропша в присутствии композиционных материалов, содержащих наноразмерные частицы кобальта»

10.25 **Штейнман Альберт Александрович** «Эффект внешнесферного донора на хемоселективность и активность металлокомплексного катализатора»

10.40 **Хиврич Екатерина Николаевна** «Модифицированные цеолитные катализаторы конверсии диметилового эфира в низшие олефины»

10.55 **Флид Виталий Рафаилович** «Молекулярный дизайн каталитических систем в реакциях с участием норборнадиена»

11.10 **Кипнис Михаил Аронович** «Особенности реализации сильно экзотермических реакций на гетерогенных катализаторах»

11.25 **Лукьянова Наталия Игоревна** «Особенности проницаемости пористых металлооксидных покрытий, полученных алкоксометодом»

Вечерняя сессия

Гомогенный и гетерогенный катализ, химическая физика поверхности

Ведущий: проф. Цодиков М.В.

16.00 **Герасимов Евгений Юрьевич** «Особенности микроструктуры твердых растворов $La_{1-x}Ca_xMO_3$ ($M = Fe, Co$) при термическом воздействии»

16.15 **Гаврилов Константин Николаевич** «Асимметрические индукторы со стереогенными атомами фосфора и их значение в энантиоселективном металлокомплексном катализе»

16.30 **Алешин Юрий Константинович** «Сравнение физических характеристик металлических пленок на металлических подложках»

16.45 **Жильцова Елена Петровна** «Каталитические системы на основе 1,4-диазабипцикло[2.2.2]октана и его моно- и бис-четвертичных производных»

17.00 **Парфенов Владимир Александрович** «Размерный эффект при синтезе SBA-15 с участием фторидов»

17.15 **Пахаруков Илья Юрьевич** «Корректное измерение каталитической активности в лаборатории»

17.30 Перерыв

17.40 **Букина Зарета Муратовна** «Влияние условий ионного обмена на кислотные и каталитические свойства цеолита LA-H-ZSM-5»

17.55 **Стецюра Светлана Викторовна** «Влияние электростатического взаимодействия на границе раздела полиэлектролит - полупроводниковая подложка на эффективную толщину осаждаемого слоя»

18.10 **Зенковец Галина Алексеевна** «Новые наноматериалы на основе диоксида титана и их применение в катализе»

18.25 **Гаврилов Владимир Юрьевич** «Адсорбция H_2 при 77 К на алюмофосфатных цеолитах AlPO»

27 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 3 (гомогенный и гетерогенный катализ, кинетика и динамика химических реакций, химическая физика поверхности)

- 1. Бельмесов Андрей Александрович** «Электрохимические процессы на границе H⁺-электролит | Pt/Ru_xTi_{1-x}O₂, газ»
- 2. Берестнева Юлия Васильевна** «Роль катиона и аниона в химической активации гидропероксидов солями четвертичного аммония»
- 3. Бугрова Татьяна Александровна** «Каталитическое дегидрирование изобутана в изобутилен на Al - Cr катализаторах»
- 4. Гаврилов Владислав Константинович** «P*,P*-бидентатные диамидофосфиты на основе 1,4-диолов как высокоэффективные лиганды для Pd-катализируемого аллильного замещения»
- 5. Городецкий Владимир Владимирович** «Природа нано-волн в реакциях каталитического окисления CO и H₂ на Pt: активные центры, критические параметры, самоорганизация»
- 6. Горшкова Ксения Олеговна** «Разработка оптимальных условий для получения металлических структур на поверхности стеклокерамики СТ-50-1 методом лазерно-индуцированного осаждения металлов из растворов, с целью дальнейшего создания "микро-термопары" Ni-Cu»
- 7. Губанов Михаил Александрович** «Сокаталитический эффект Re и W (Ta) в реакции превращения этанола и глицерина в олефины C₃-C₁₂»
- 8. Гуринович Наталья Сергеевна** «Исследование методом спектроскопии ЭПР природы анион-радикальных частиц, формирующихся в процессе функционирования катализаторов Брукхарта»
- 9. Евщик Елизавета Юрьевна** «Исследование процесса разрушения микрокристаллического кремния при интеркалировании литием»
- 10. Жеглов Сергей Викторович** «P,P*- бидентатные фосфино-диамидофосфитные лиганды в энантиоселективных Pd-катализируемых реакциях замещения»
- 11. Захаров Виктор Владимирович** «Изучение термического разложения молекулярного комплекса фуразано-1,2,3,4-тетразин-1,3-диоксида с 2,4-динитро-2,4-диазапентаном методами ДСК и ДТГ»
- 12. Зюзин Игорь Николаевич** «Реакционная способность алкокси-NNO-азоксисоединений по отношению к неорганическим восстановителям»
- 13. Юданов Владислав Васильевич** «Влияние числа активных высокочастотных колебательных мод на закон энергетической щели»
- 14. Исмаилов Этибар Гумбат** «Методические особенности определения элементного состава поверхности и приповерхностных слоев твердых катализаторов методом рентгенофлуоресцентной микроскопии»
- 15. Каичев Василий Васильевич** «Механизм возникновения автоколебаний в реакции каталитического окисления пропана на никеле»
- 16. Калинин Александр Петрович** «Комплекс гиперспектральных модулей диапазона 0,2 -1 мкм»
- 17. Киселёв Владимир Дмитриевич** «Вовлечение очень пассивных диенов в реакции циклоприсоединения с самым активным диенофилом»
- 18. Константинов Григорий Игоревич** «Получение водородсодержащего газа путем воздействия СВЧ излучения на нефтяные продукты»
- 19. Королёв Владимир Юрьевич** «Квантово-химический расчет взаимодействия молекул CO с поверхностью нестехиометрического гидрида палладия»
- 20. Кирман Марина Викторовна** «Динамика доменных стенок в хиральных магнетиках»
- 21. Куртиян Тигран Степанович** «Механизм реакции диоксигенации NO металлопорфириновыми комплексами, моделирующими активный центр оксиглобинов»

22. **Лохман Валерий Николаевич** «Динамика внутрикластерных процессов, индуцированных в молекулярных кластерах резонансным УФ и ИК фемтосекундным лазерным излучением»
23. **Магаев Олег Валерьевич** «Исследование влияния полифосфатного пластификатора на каталитические и реологические свойства»
24. **Матцат Юлия Викторовна** «Эпоксидирование метилового эфира олеиновой кислоты в условиях межфазного катализа»
25. **Махаев Виктор Дмитриевич** «Синтез и исследование каталитической активности координационных соединений металлов 4-6 групп с феноксииминными и бис-фенольными лигандами в реакции полимеризации этилена»
26. **Мисюра Сергей Яковлевич** «Влияние характерных скоростей на кинетику диссоциации природного и искусственного гидрата метана, двойных гидратов с добавками спирта и соли»
27. **Николаев Сергей Александрович** «Синергетические эффекты в катализе гидрирования ацетиленовых производных и окисления CO на Au- и Pd-содержащих наночастицах»
28. **Парфенов Владимир Александрович** «Гексагональное упорядочение при экспандировании силикатов типа МСМ-41»
29. **Петровский Станислав Константинович** «Исследование каталитических систем полимеризации этилена на основе комплексов никеля с дииминовыми лигандами методом спектроскопии ЭПР»
30. **Попов Руслан Семенович** «Исследование влияния поляризации угловых моментов на дифференциальные сечения в химической реакции $Li+HF$ »
31. **Просвирина Игорь Петрович** «Изучение реакции полного окисления метана на Pd/Al₂O₃ катализаторах методом in situ РФЭС»
32. **Простнев Александр Сергеевич** «Моделирование рекомбинации атомов в поверхностном слое твердого тела»
33. **Ракитин Владимир Валерьевич** «Влияние условий отжига на состав тонких пленок CZTS, полученных методом одностадийного электроосаждения»
34. **Ростовщикова Татьяна Николаевна** «Влияние носителя на строение и каталитические свойства Pd и Ni катализаторов гидродехлорирования»
35. **Садовская Екатерина Михайловна** «Реакционная способность поверхностных форм кислорода MoVTenb оксидных катализаторов в парциальном и глубоком окислении углеводородов»
36. **Свиридова Лиана Николаевна** «Структура межфазной границы электрод/электролит в присутствии комплекса катиона аммония с криптаном 2.2.2.»
37. **Смиховская Александра Викторовна** «Исследование возможности получения медных структур на поверхности поликристаллического оксида алюминия методом ЛОМР»
38. **Старикова Анна Александровна** «Основность серии пара-замещенных и октаметил-замещенных тетрафенилпорфиринов»
39. **Старикова Татьяна Александровна** «Твердоконтактные электроды на основе Mn(III)TRPCl»
40. **Стецюра Светлана Викторовна** «Изменение качества полиэлектролитного слоя при освещении полупроводниковой подложки во время адсорбции»
41. **Теплов Олег Алексеевич** «Кинетика восстановления синтезированных и природных магнетитов водородом»
42. **Товбин Юрий Константинович** «Численная реализация теории плавления в щелевидных порах»
43. **Товбин Юрий Константинович** «Возможность разработки экспрессных методов расчета колебательного движения атомов в неоднородных системах»

44. **Ульянов Алексей Владимирович** «Термостойкость композитов на основе резвератрола и графитированной термической сажи»
45. **Федорова Юлия Евгеньевна** «Нанокompозитные катализаторы на основе оксидов с высокой кислородной подвижностью и Ni, Co или Ru для паровой конверсии этанола»
46. **Федотов Роман Николаевич** «Пассивация поверхности титана озоном»
47. **Фишгойт Лариса Александровна** «Электроосаждение сплавов системы Fe-Co-Ni-P и установление корреляции между содержанием металлов в осажденных сплавах и составом исходных растворов»
48. **Чернавский Петр Александрович** «Влияние внешнего магнитного поля на кинетику восстановления оксида кобальта и закиси меди»
49. **Чоба Мария Алексеевна** «Влияние эффектов поверхностной сегрегации на скорость электрохимических реакций»
50. **Чучелкин Илья Валерьевич** «Катализируемые палладием реакции асимметрического аллилирования с участием новых P,N-бидентатных фосфорамидитов на основе BINOL»
51. **Шилина Марина Ильинична** «Адсорбционные свойства и каталитическая активность модифицированных алюмосиликатов в жидкофазной конверсии алканов»
52. **Ширяев Алексей Александрович** «Rh- и Pd-катализируемые асимметрические превращения с использованием хиральных фосфопроизводных 1,2-диаминов»
53. **Шутилов Алексей Александрович** «Влияние добавок оксида церия на физико-химические и каталитические свойства катализаторов Pd/TiO₂ в реакции окисления CO»
54. **Шутилов Роман Александрович** «Распределение медьсодержащей компоненты в Cu/ZSM-5»
55. **Черепанова Светлана Витальевна** «Оксиды, полученные терморазложением слоистых MgAl, MgGa и NiAl гидроксидов: структура и способность к регидратированию»
56. **Вашурин Артур Сергеевич** «Каталитические свойства металлофталоцианинов, иммобилизованных на полимерных матрицах»
57. **Соколова Валерия Викторовна** «Исследование влияния лигандного окружения на каталитические свойства комплексов платины (IV) для процесса жидкофазного оксигенирования толуола»
58. **Соколова Валерия Викторовна** «Влияние растворителя на кинетику низкотемпературного жидкофазного процесса оксигенирования углеводов в присутствии инкорпорированных в полимерную матрицу кластеров металлов переменной валентности»
59. **Торбина Виктория Вячеславовна** «Жидкофазное окисление глиоксаля на гетерогенных катализаторах в проточном реакторе»
60. **Чепайкин Евгений Григорьевич** «Моноксид углерода-лиганд и реагент в металлокомплексном катализе»
61. **Трайтак Сергей Дмитриевич** «Теория диффузионно-контролируемых реакций в полых наносферах»
62. **Фокин Нлья Геннадьевич** «Влияние условий проведения процесса парциального газофазного окисления пропана на соотношение [CH₃OH]/[CO] в получаемых продуктах»
63. **Андбаева Валентина Николаевна** «Капиллярная постоянная раствора метан-азот-гелий в интервале температур 105-160 K»
64. **Бунин Игорь Жанович** «АСМ-исследование свойств поверхности галенита, модифицированной высоковольтными наносекундными импульсами»

Вечерняя сессия

Фотохимия и радиационная химия, химическая радиоспектроскопия

Ведущий: проф. Кожушнер М.А.

15.30 **Васютинский Олег Святославович** «Поляризованная флуоресценция в флуорофорах, возбуждаемая фемтосекундными лазерными импульсами»

16.10 **Будыка Михаил Федорович** «Химическая физика молекулярных логических вентиляей»

16.40 **Поздняков Пван Павлович** «Быстрые процессы в фотофизике I2-замещенного BODIPY»

16.55 Перерыв

17.00 **Шушин Анатолий Иванович** «Генерация электронной спиновой поляризации радикалов в процессах тушения триплетных возбужденных состояний молекул»

17.15 **Дё Виктор Владимирович** «Формирование металлических наноструктур при рентгеновском облучении растворов и гелей полиэлектролитов»

17.30 **Иванов Анатолий Иванович** «Разделения зарядов в возбужденных в состояние диадах цинк-порфирин-акцептор и триадах цинк-порфирин-акцептор1-акцептор2»

17.45 **Авакян Виталий Гайкович** «Вибронная структура полос флуоресценции трехкомпонентных комплексов циклодекстринов»

18.00 **Чистяков Андрей Валерьевич** «Конверсия биосубстратов в топливные компоненты в присутствии Pd-Zn содержащих катализаторов»

18.15 **Чесноков Евгений Николаевич** «Когерентно-оптические эксперименты на лазере на свободных электронах. Сверхбыстрая time-domain спектроскопия газов.»

28 СЕНТЯБРЯ, СУББОТА

Утренняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий д.ф.-м.н. Ассовский И.Г.

9.00 **Хомик Сергей Викторович** «Инициирование и подавление взрывных процессов в смесях водорода с воздухом посредством проницаемых преград»

9.30 **Иванов Михаил Федорович** «Режим ускорения пламени и механизм формирования детонации в каналах»

9.45 **Балаян Геворг Владимирович** «Характер горения метано-воздушной смеси в присутствии различных добавок»

10.00 **Рахметов Аян Нурумович** «Парциальное окисление метана в матричных горелочных устройствах»

10.15 Перерыв

10.25 **Коробейничев Олег Павлович** «Исследование перемешанных пламен метил пентаноата с помощью молекулярно пучковой масс-спектрометрии с фотоионизацией синхротронным излучением и с мягкой ионизацией электронным ударом, а также компьютерного моделирования»

10.40 **Смыгалина Анна Евгеньевна** «Горение смесей на основе водорода в газопоршневом двигателе»

10.55 **Кислов Владимир Михайлович** «Проблемы устойчивости интенсификации фильтрационного горения»

11.10 **Кочетков Роман Александрович** «Закономерности горения порошковой и гранулированной смесей Ti+TiC в спутном потоке азота»

11.25 **Кочетков Роман Александрович** «Влияние гранулирования на механизм передачи тепла при горении смеси Ti+0.5C в спутном потоке азота»

Вечерняя сессия

Горение и взрыв

Ведущий д.ф.-м.н. Медведев С.П.

15.30. **Ассовский Игорь Георгиевич** «Ультрапористые наноструктурные керамики. Новые методы получения»

16.00 **Горшков Владимир Алексеевич** «Механизм химических превращений в волне горения при автоволновом синтезе литых силицидов молибдена и титана»

16.15 **Мохин Григорий Николаевич** «Геометрические факторы образования очагов теплового взрыва»

16.30 Перерыв

16.40 **Моногаров Константин Александрович** «Горение микро- и нанодисперсных термитов в замкнутом объеме»

16.55 **Ассовский Игорь Георгиевич** «Капельный метод для определения высокотемпературной кинетики разложения энергоемких жидких композиций»

17.10 **Вадченко Сергей Георгиевич** «Растекание некоторых металлов по горящим пленкам из смесей титана с бором, углеродом и кремнием»

17.25 **Мееров Дмитрий Борисович** «Исследование процесса агломерации при горении ЭКС на основе нитраминол»

17.40 **Лавров Владимир Васильевич** «Взрывоопасность современных минеральных удобрений на основе нитрата аммония»

17.55 **Лавров Владимир Васильевич** «О влиянии химического состава на детонационные параметры смесевых ВВ с эмульсионной структурой»

29 СЕНТЯБРЯ, ВОСКРЕСЕНЬЕ

Утренняя сессия

10.00 Стендовая сессия № 4 (элементарные процессы, фотохимия и радиационная химия, химическая радиоспектроскопия, горение и взрыв)

1. Бердинский Виталий Львович «Спин-зависимая рекомбинация атомов азота при низких температурах»

2. Будыка Михаил Федорович «Синтез, спектральные и фотохимические свойства гибридных наноструктур на основе 2-(4-[4-меркаптонон-1-окси]стирил)хинолина и квантовой точки CdS»

3. Терентьев Алексей Владимирович «Адсорбция нежестких молекул на графитированной термической саже с учетом слабых водородных связей»

4. **Викулова Мария Александровна** «Синтез и исследование фотоактивных наноконпозитов на основе продуктов утилизации отработанных гальванических растворов никелирования»
5. **Волкова Нина Николаевна** «Кинетические закономерности уменьшения массы и рост удельной поверхности активированного угля при его окислении в потоке воздуха»
6. **Гордон Диляра Ахметовна** «Особенности радикальной полимеризации ацетиленовых мономеров»
7. **Дубовицкий Владимир Абрамович** «Вычисление состава продуктов детонации и оптимизация динамических характеристик смесевых взрывчатых веществ»
8. **Калинин Александр Петрович** «Методика восстановления межатомного и межмолекулярного потенциала взаимодействия из данных по упругому рассеянию в широком диапазоне расстояний сближения»
9. **Калинин Александр Петрович** «Установка для выращивания кристаллов со строго заданными оптическими свойствами»
10. **Карелин Александр Носафович** «Метастабильные кристаллические фазы $\text{H}_5\text{O}_2+\text{ClO}_4^-$ и $\text{D}_5\text{O}_2+\text{ClO}_4^-$: стабилизация изотопами водорода»
11. **Ковалева Диана Сергеевна** «Изучение фотокаталитической активности модифицированных полититанатов калия на примере фотодеградации метиленового синего»
12. **Колесникова Юлия Юрьевна** «Изменение характеристик фильтрационного горения углерода при добавлении CO_2 в состав окислителя»
13. **Ли Виталий Моисеевич** «Протон-управляемый перенос энергии в стирилхинолин-мероцианиновой диаде SQ3MC»
14. **Максимова Ольга Геннадьевна** «3D моделирование инициирования детонации в смеси синтез-газ - воздух ударной волной, прошедшей через перфорированную перегородку»
15. **Мартьянов Тимофей Петрович** «Фотохимическое поведение бис(18-краун-6)азобензола и его супрамолекулярных комплексов с диааммонийными соединениями»
16. **Никольский Сергей Николаевич** «ЭПР-спектроскопия ионных пар 3,6-дигрет.бутилортосемихинона»
17. **Масягутова Гульшат Авхадиевна** «Хемилюминесценция при твердофазном взаимодействии сульфатов церия(III, IV) с дифторидом ксенона»
18. **Масягутова Гульшат Авхадиевна** «Исследование хемилюминесценции в растворе производных 1,2,4-триазола»
19. **Машковцев Рудольф Иванович** «Ge E_1 центр в альфа-кварце: ^{73}Ge , ^{17}O , ^{29}Si СТВ и *ab initio* расчеты»
20. **Медведев Сергей Павлович** «Параметры газа за отраженной ударной волной при использовании ударной трубы для измерения низкотемпературных задержек самовоспламенения смесей водорода и синтез-газа с воздухом»
21. **Михайлов Александр Валерьевич** «Лазерное инициирование КЭМ гетерогенной структуры: физические гипотезы о развитии процесса и сквозная физико-математическая модель»
22. **Михалкин Виктор Николаевич** «Пределы режимов взрывного превращения в смесях синтез-газа и углеводородов с воздухом»
23. **Николаева Валентина Викторовна** «Радиолиз кумаринсодержащих экстрактов лекарственных растений»
24. **Озеров Георгий Константинович** «Реакция околопороговой ассоциативной ионизации $\text{N}(^2\text{D}) + \text{O}(^3\text{P}) \rightarrow \text{NO}^+(\text{X}^1\Sigma^+) + \text{e}^-$ »
25. **Пичугина Екатерина Сергеевна** «Геометрическая фаза Берри в спин-зависимых процессах»

26. **Покоев Александр Владимирович** «Влияние добавок никеля на параметры магнитоэластического эффекта в медно-бериллиевых сплавах, состаренных в постоянном магнитном поле»
27. **Поташова Наталья Игоревна** «Фотохимические свойства стирилхинолин-нафтольной диады S3N»
28. **Пятаков Николай Федорович** «Синтез, свойства и закономерности горения простых эфиров диметилонитрамина»
29. **Сафаров Фарит Эрикович** «Хемилюминесценция при распаде эндопероксида 1,4-диметилнафталина в присутствии бета-дикетонатных комплексов Nd(III), Yb(III) и Eu(III)»
30. **Сергеев Олег Вячеславович** «Молекулярно-динамическое моделирование распространения фронта горения в ТЭНе»
31. **Султанбаев Михаил Валерьевич** «Теоретическое и экспериментальное спектрально-люминесцентное исследование водных растворов и кристаллического состояния 5 фторурацила»
32. **Султанбаев Михаил Валерьевич** «Сверхбыстрые излучательные $S_2 \rightarrow S_0$ переходы урацилов в растворах»
33. **Суханов Андрей Анатольевич** «Исследование методом ЭПР цинкпорфиринового триммера»
34. **Сухов Алексей Валентинович** «Эффект проскока пламени по газообразным продуктам при воспламенении вспененного полиуретанового эластомера»
35. **Тереза Анатолий Михайлович** «Воспламенение пропана в ударных волнах»
36. **Тереза Анатолий Михайлович** «Процессы, механизмы и кинетические модели образования частиц сажи при пиролизе и окислении различных смесей этилена и ацетилен в ударных волнах»
37. **Тихонов Геннадий Викторович** «Люминесценция Dy^{3+} в урансодержащих неорганических жидкостях»
38. **Цветков Максим Вадимович** «Каталитическая термopереработка биомассы в режиме фильтрационного горения»
39. **Новосадов Борис Константинович** «К теории оптического возбуждения молекул фемтосекундным лазерным импульсом»
40. **Костров Андрей Николаевич** «Первичные процессы фоторазделения зарядов в ФС1 мутантных штаммов *Synechocystis sp* PCC 6803»
41. **Спицына Наталья Германовна** «Сравнительное исследование фотовольтаических свойств композиционных материалов полимер/фуллерен-фталоцианин»
42. **Бочаров Константин Викторович** «Влияние областей когерентного рассеяния на микроволновую фотопроводимость поликристаллических $CuIn_{1-x}Ga_xSe_2$ »
43. **Бочаров Константин Викторович** «Влияние соотношения индия и галлия на микроволновую фотопроводимость и катодолюминесценцию $CuIn_{1-x}Ga_xSe_2$ »
44. **Голубков Максим Геннадиевич** «Возмущение ридберговских состояний атома полем нейтральной частицы»
45. **Голубков Геннадий Валентинович** «Тушение ридберговских состояний в медленных столкновениях с нейтральными атомами и молекулами среды»
46. **Морозов Вадим Андреевич** «Математическое моделирование тушения двухполосной флуоресценции»
47. **Титова Татьяна Юрьевна** «Применение квантово-химического подхода к исследованию устойчивых геометрических структур молекулы лаурдана»
48. **Матвеев Алексей Анатольевич** «"Взрывающиеся" полимеры и их роль в инициировании смесевых составов при ударе»
49. **Барановский Николай Викторович** «Математическое и физическое моделирование процессов зажигания лесных горючих материалов сфокусированным солнечным излучением»

50. Шлотгауэр Анна Артуровна «Исследование особенностей радикальных процессов с участием ацетиленовых производных природного алкалоида лаппаконитина»

Вечерняя сессия

16.00 Закрытие Конференции

30 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК

Выходной

1 ОКТЯБРЯ, ВТОРНИК

Отъезд участников

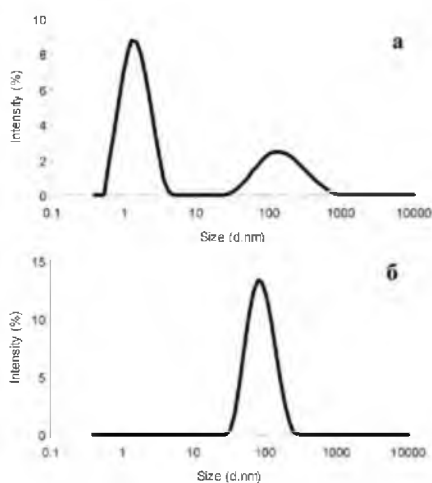


Рис. 1. Распределение частиц по размерам в среде **3** (а) и в среде **1+3** (б), при концентрации **1** 10^{-10} М, 25 °С.

коррелируют с аналогичными зависимостями водных растворов **1**.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-03-31304, № 13-03-00002).

1. И.С. Рыжкина, Л.И. Муртазина, и др. *ДАН*, 2011, **438**, № 2, С. 207-211.
2. И.С. Рыжкина, Л.И. Муртазина, и др. *ДАН*, 2012, **446**, № 6, С. 646-652.

Влияние внешнего постоянного магнитного поля на удельную проводимость однослойной углеродной нанотрубки

Невзорова Ю.В., Иванченко Г.С., Лебедев Н.Г.
ВолГУ, Волгоград

Углеродные нанотрубки (УНТ) являются уникальными системами. Их нанометровый диаметр и микронная длина указывают на то, что они наиболее близки по своей структуре к идеальным одномерным системам. Поэтому УНТ представляются идеальными объектами для проверки теории квантовых явлений. Они химически и термически стабильны по крайней мере до 2000 К, обладают превосходной теплопроводностью, уникальными прочностными (на порядок прочнее стали) и механическими характеристиками [1].

В данной работе проводится теоретическое исследование влияния внешнего магнитного поля на температурную зависимость удельной электропроводности однослойной углеродной нанотрубки (ОУНТ).

Расчет зонной структуры исследуемой системы проводится методом МО ЛКАО с использованием π - электронного приближения.

Для моделирования электронной структуры ОУНТ использовалась модель Хюккеля-Хаббарда. В рамках данной модели Гамильтониан системы учитывает энергию электронных переходов, кулоновского

(рис. 1б). Нелинейные концентрационные зависимости физико-химических свойств **1+3** (рН, χ) связаны с изменением параметров смешанных структур **1+3**. Сопоставление концентрационных зависимостей физико-химических свойств многокомпонентных систем **1+2**, **1+3** и водных растворов **1** свидетельствует о том, что в системах **1+2** и **1+3** происходит инициированное растворами **1** образование новых структур, приводящее к изменению физико-химических свойств смешанных систем. Концентрационные зависимости физико-химических свойств и параметров структур, формирующихся в **1+2** и **1+3**,

взаимодействия между электронами, а также, взаимодействия электронов с внешним постоянным магнитным полем.

С помощью метода функций Грина было получено выражение для тензора удельной проводимости ОУНТ в двухзонной модели Хаббарда[2]

Результаты расчетов показали, что учет цилиндрической структуры дает малую поправку для закона дисперсии π – электронов. В следствии этого, изменение температурной зависимости удельной электропроводности не существенно. Влияние внешнего постоянного магнитного поля приводит к расщеплению энергетических уровней, а также к изменению ширины запрещенной зоны. Это приводит к падению проводимости в области низких температур (около 40 К).

Литература

[1] Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2010. 488 с.

[2] Иванченко Г. С., Лебедев Н. Г. // Физика твердого тела. 2007. Т. 49. № 1. С.183-189.

Синергетические эффекты в катализе гидрирования ацетиленовых производных и окисления СО на Au- и Pd-содержащих наночастицах

Николаев С.А., Голубина Е.В., Кротова И.Н., Ростовщикова Т.Н.
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Методами ионного обмена и пропитки синтезированы катализаторы, содержащие биметаллические частицы Au-M и Pd-M (M = Ni, Ce, Zr, Ag, Cu, Zn) размером 3-10 нм, нанесенные на оксидные носители (Al₂O₃, ZrO₂, ZnO, TiO₂). Морфология и электронные свойства нанесенных частиц изучены методами РФА, ПЭМ, РФЭС, XAS. Каталитические свойства полученных систем исследованы в реакциях гидрирования ацетилена или фенилацетилена при 273-423 К и окислении СО при 273-723 К.

В гидрировании ацетилена выявлен синергетический эффект повышения активности Au-Ni катализаторов, который существенно зависит от морфологии Au-Ni частиц и природы носителя. Относительное повышение активности на Au-Ni составило 470; 370; 170 и 150 %, для катализаторов на основе Al₂O₃, ZnO, ZrO₂, TiO₂, соответственно.

В гидрировании фенилацетилена модификация частиц Pd добавками Zn и Ag приводит к снижению скорости образования побочных продуктов (олигомеры и этилбензол). В окислении СО молекулярным кислородом введение Zr и Ni в состав частиц Au приводит к росту конверсии СО в два раза, при этом монометаллические системы на основе Zr и Ni не обладают собственной окислительной активностью. Рассмотрены причины роста активности и селективности в биметаллических системах с учетом механизма реакций и особенностей строения полученных катализаторов.