

**Программа конференции с международным участием
«Физическая химия в России и за рубежом: от квантовой химии до эксперимента»
(ИПХФ РАН, Черноголовка, 2019)**

17 ИЮНЯ

Секция 1. Моделирование биохимических систем и процессов в них (Б)

Ведущие: Добровольский Ю.А., Лужков В.Б.

8-00		Регистрация участников*
9-00		<p align="center">ОТКРЫТИЕ КОНФЕРЕНЦИИ</p> <p align="center">Вступительное слово:</p> <p>Добровольский Юрий Анатольевич (председатель оргкомитета, ИПХФ РАН) Алдошин Сергей Михайлович (научный руководитель ИПХФ РАН) Ломоносов Игорь Владимирович (врио директора ИПХФ РАН) Егоров Олег Викторович (мэр г. Черноголовка)</p> <p align="center">Паевский Алексей Сергеевич "Становление квантовой химии в России"</p>
9-30	П-Б1	<p>Чаркин Олег Петрович, Клименко Н.М. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)</p> <p>"DFT расчеты и экспериментальные исследования структуры и стабильности биологических и неорганических субнаноразмерных молекул и кластеров"</p>
10-05	П-Б2	<p>Григоренко Б.Л., Поляков И.В., Хренова М.Г., Немухин Александр Владимирович (МГУ, ИБХФ РАН и ИНБИ РАН, Москва, Россия)</p> <p>"Молекулярное моделирование флуоресцентных белков: от квантовой химии хромофоров до динамики макромолекул"</p>
10-40		Кофе-пауза
10-50	П-Б3	<p>Лужков Виктор Борисович, Крапивин В.Б., Сень В.Д. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; МГУ, Москва, Россия)</p> <p>"Квантово-химические расчеты потенциалов одноэлектронного окисления нитроксильных радикалов в биологически активных молекулах"</p>
11-25	У-Б1	<p>Поляков Игорь Вадимович, Григоренко Б.Л., Немухин А.В. (МГУ и ИБХФ, Москва, Россия)</p> <p>"Моделирование структур и спектров флуоресцентных белков на основе бактериальных фитохромов"</p>
11-40	У-Б2	<p>Хренова Мария Григорьевна, Кривицкая А.В., Цирельсон В.Г. (ИНБИ РАН, МГУ и РХТУ, Москва, Россия)</p> <p>"Применение электронных дескрипторов межатомных взаимодействий для детализации механизмов ферментативных реакций"</p>

Секция 2. Квантовая химия элементарных реакций (Э)

Ведущие: Мебель А.М., Тарасов Б.П.

11-55	П-Э1	<p>Мебель Александр Моисеевич (Флоридский международный университет, Майами, США)</p> <p>"Reaction mechanisms and rate constants of PAH growth in astrophysical environments"</p>
-------	------	--

12-30	П-Э2	Соломоник Виктор Геннадьевич (НИИ ТиК, Иваново, Россия) “Молекулярная спектроскопия из первых принципов: проблемы и достижения”	
13-05		Обед	
14-00	П-Э3	Боженко Константин Викторович , Болдырев А.И., Куличенко М.Б., Утеньшев А.Н. (ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия; Университет штата Юта, Логан, США) “Квантово-химическое моделирование реакций внедрения в связь типа $MY_2+H_2 \rightarrow MY_2H_2$ ($M=C, Si, Al, B$ и $Y=H, F, Cl$) и $MY^+ + H_2 \rightarrow MYH_2^+$ ($M=C, Si$ и $Y=H, F, Cl$)”	
14-35	П-Э4	Болдырев Александр Иванович (Университет штата Юта, Логан, США; ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия) “Delocalized bonding in chemistry”	
15-10	У-Э1	Григорьев Федор Васильевич , Сулимов В.Б., Тихонравов А.В. (МГУ, Москва, Россия) “Молекулярно-динамическое моделирование напыления тонких пленок, состоящих из слоев с чередующейся плотностью”	
15-25	У-Э2	Ананьев Максим Васильевич (ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия) “Isotope exchange between components of the gas phase and oxides: theory and experiment”	
15-40	У-Э3	Фурсиков Павел Владимирович , Чаркин О.П., Тарасов Б.П. (ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия) “Водород-аккумулирующие наноразмерные материалы на основе магния и алюминия: поиск корреляции между экспериментом и расчетом”	
15-55		Кофе-пауза	
16-05	У-Э4	Рыкунов Алексей Александрович , Емелин Д.А. (РФЯЦ – ВНИИТФ, Снежинск, Россия) “Свойства гидридов плутония по данным теории функционала плотности”	
16-20	У-Э5	Наваркин Илья Сергеевич , Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново, Россия) “Эффекты электронной корреляции в молекулах тригалогенидов лантаноидов, обладающих множеством низколежащих возбужденных электронных состояний”	
16-35	У-Э6	Мальцев Алексей Павлович , Чаркин О.П. (МГУ, Москва, Россия; ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия) “Теоретическое моделирование реакций ступенчатого присоединения молекул H_2 к магниевым кластерам Mg_{18} и $Mg_{17}Ni$ ”	
16-50	У-Э7	Сабиров Денис Шамилович (ИНК УФИЦ РАН, Уфа, Россия) “DFT исследование реакционной способности и поляризуемости фуллеренов и их производных”	
17-05	С	Стендовая сессия. Секции 1 и 2 (краткие устные сообщения)	
18-00		Кофе-пауза	
18-10	Ш	Школа молодых ученых Чаркин Олег Петрович (ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия) “DFT моделирование биоорганических молекул”	Круглый стол “Дискуссионные вопросы квантовой химии”: Кочнев Валентин Константинович (Москва, Россия)

18-55	Ш	Школа молодых ученых Мусаев Джамаладдин Г. (Университет Эмори, Атланта, США) <i>"Multi-disciplinary efforts toward novel catalysis design for the solar-to-chemical conversion and selective C-H functionalization"</i>	<i>"Расчёт атомных энергий с помощью электронного химического потенциала"</i> Шека Елена Федоровна (РУДН, Москва, Россия) <i>"Spin delocalized topochemistry of sp² nanocarbons"</i>
20-00		Приветственный фуршет	

18 ИЮНЯ

Секция 3. Строение и превращение органических молекул (О)

Ведущие: Мусаев Д.Г., Шестаков Г.Ф.

9-00	П-О1	Мусаев Джамаладдин Г. (Университет Эмори, Атланта, США) <i>"Multi-disciplinary efforts toward catalyst design: insight into the C-H functionalization jungle"</i>
9-35	У-О1	Витковская Надежда Моисеевна , Орел В.Б., Кобычев В.Б., Бобков А.С., Трофимов Б.А. (ИГУ и ИРИХ СО РАН, Иркутск, Россия) <i>"Новые реакции ацетилена и их продукты: квантовая химия и эксперимент"</i>
9-50	У-О2	Орел Владимир Борисович , Абсалямов Д.З., Витковская Н.М. (ИГУ, Иркутск, Россия) <i>"Механизмы реакций винилирования и этинирования кетиминов и гидразонов фенилацетиленом в суперосновных средах: квантовохимическое исследование"</i>
10-05	У-О3	Шестаков Александр Федорович (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия) <i>"Structure and reactivity of fullerene-nitrogen complexes of alkali metals"</i>
10-20	У-О4	Рыбаков А.А., Брюханов И.А., Ларин Александр Владимирович , Тодорова С., Жидомиров Г.М. (МГУ, ИМАШ РАН, Москва, Россия; Институт катализа БАН, София, Болгария; ИК СО РАН, Новосибирск, Россия) <i>"Reduced model of Pd slabs grown over different oxides for methane oxidation: modeling O diffusion in Pd for PdO regeneration"</i>
10-35	У-О5	Батаев Вадим Альбертович , Пупышев В.И., Годунов И.А. (МГУ, Москва, Россия) <i>"Сложный характер внутреннего вращения в некоторых ароматических и гетероциклических молекулах"</i>
10-50		Кофе-пауза
11-05	У-О6	Емельянова Нина Сергеевна , Покидова Т.С. (ИПХФ РАН Черноголовка, МГУ, Россия) <i>"Квантово-химическое моделирование реакций согласованного распада циклов"</i>
11-20	У-О7	Levina E.O., Chernyshov I.Y., Voronin A.P., Alekseiiko A.N., Stash A.I., Венер Михаил Владимирович (МФТИ, Долгопрудный, Россия; ИОНХ РАН, Москва, Россия; ИХР РАН, Иваново, Россия; ДВФУ, Владивосток, Россия; НИФХИ, Москва, Россия) <i>"Solving the enigma of weak fluorine contacts in solid state: a periodic DFT study of fluorinated organic crystals"</i>

11-35	У-08	Жигулин Григорий Юрьевич , Каткова М.А., Кетков С.Ю. (ИМХ РАН, Нижний Новгород, Россия) "A novel α -aminohydroximate Sr(II)-Cu(II) 15-metallacrown-5: DFT investigation of electronic structure and stability in water solution"
11-50	С	Стендовая сессия. Секции 3 и 4 (краткие устные сообщения)
13-15		Обед
14-15	Ш	Школа молодых ученых Болдырев Александр Иванович (Университет штата Юта, Логан, США; ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия) "Множественная ароматичность, множественная антиароматичность и конфликтная ароматичность в химии"
15-00	Ш	Школа молодых ученых Мебель Александр Моисеевич (Флоридский международный университет, Майами, США) "Механизмы роста полициклических ароматических углеводородов"
16-00		Экскурсия

19 ИЮНЯ

Секция 4. Квантово-химические расчеты и экспериментальные данные в исследовании электрохимических процессов (ЭХ)

Ведущие: Зюбин А.С., Назмутдинов Р.Р.

9-00	П-ЭХ1	Зюбин Александр Сергеевич , Зюбина Т.С., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия) "Квантово-химическое моделирование анодных материалов на основе кремния для литий-ионных источников тока"
9-35	У-ЭХ1	Назмутдинов Ренат Равильевич , Шермухамедов С.А., Бронштейн М.Д., Зинкичева Т.Т., Глухов Д.В.. (КНИТУ, Казань, Россия) "Molecular modelling of electron transfer in nanoscale: new insights and old challenges"
9-50	У-ЭХ2	Кисленко Виталий Александрович , Кисленко С.А. (МФТИ, Долгопрудный, Россия; ОИВТ РАН, Москва, Россия) "Влияние дефектов базальной поверхности графена на скорость гетерогенного переноса электрона"
10-05	У-ЭХ3	Филимоненков Иван Сергеевич , Истомина С.Я., Антипов Е.В., Цирлина Г.Ф., Савинова Е.Р. (МГУ, Москва, Россия; ICPEES, Strasbourg, France) "Электрокатализ кислородных реакций на Mn, Co-содержащих перовскитах: что является активными центрами?"
10-20	У-ЭХ4	Лепешкин Сергей Владимирович , Батурин В.С. (Сколтех, ФИАН, Москва, Россия) "New method for variable-composition cluster structure prediction. Application to Si_nO_m clusters ($1 \leq n \leq 15$, $0 \leq m \leq 20$)"
10-35	У-ЭХ5	Бушланова Наталья Александровна , Батурин В.С., Лепешкин С.В., Успенский Ю.А., Асланов Л.А., Захаров В.Н., Кудрявцев И.К. (МФТИ, Долгопрудный, Россия; ФИАН, Сколтех и МГУ, Москва, Россия) "Термодинамические и электронные свойства кластеров Si_nH_{2m} вблизи перехода аморфное - кристаллическое состояние"
10-50		Кофе-пауза

11-00	У-ЭХ6	Гильдина Анна Руслановна , Мебель А.М., Аязов В.Н. (Самарский университет, ФИАН, Москва, Россия; Международный Университет Флориды, Майами, Флорида, США) "Константы скорости и коэффициенты ветвления для реакции взаимодействия инденила C_9H_7 и молекулярного кислорода O_2 "
11-15	У-ЭХ7	Манжос Роман Алексеевич , Коткин А.С., Кочергин В.К., Кривенко А.Г. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; МГУ, Москва, Россия) "Восстановление кислорода на малослойных графеновых структурах, полученных плазмозлектрохимическим расщеплением графита"
11-30	У-ЭХ8	Павлов Сергей Владимирович , Кисленко С.А. (Сколтех, ОИВТ РАН и МФТИ, Москва, Россия) "Исследование влияния края графена на кинетику внешнесферного переноса электрона на молекулу кислорода"
11-45	Ш	Школа молодых ученых Соломоник Виктор Геннадьевич (НИИ ТiК, Иваново, Россия) "Методы и задачи квантовой химии в молекулярной спектроскопии"
12-30		Обед
13-30		Экскурсия в ИПХФ
15-00	Ш	Школа молодых ученых Немухин Александр Владимирович (МГУ, ИБХФ РАН и ИНБИ РАН, Москва, Россия) "Компьютерное моделирование биомолекулярных реакций"
15-45	Ш	Школа молодых ученых Лужков Виктор Борисович (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия) "Исследования связывания белков и биологически-активных соединений методом молекулярной динамики"
16-30		Кофе-пауза
16-40		Семинар по программному обеспечению Schrödinger
17-40		ЗАКРЫТИЕ КОНФЕРЕНЦИИ Добровольский Ю.А., Чаркин О.П.
19-00		Банкет, посвященный юбилею проф., д.х.н. Чаркина О.П.**

* Стойка регистрации будет работать все время проведения конференции.

** Оргвзнос не покрывает расходы на проведение банкета.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Секция 1. “Моделирование биохимических систем и процессов в них”

- С-Б1. **Капуста Дмитрий Павлович**, Брехов А.Т., Метелешко Ю.И., Бабчук И.В., Хренова М.Г. (МГУ и ИНБИ РАН, Москва, Россия)
“Разработка интерфейса для расчетов методом молекулярной динамики с потенциалами КМ/ММ”
- С-Б2. **Кулакова Анна Михайловна**, Григоренко Б.Л., Миронов В.А., Хренова М.Г. (МГУ, ИБХФ РАН и ИНБИ РАН, Москва, Россия)
“Молекулярное моделирование ковалентного связывания биливердина в белке *miRFP670*”
- С-Б3. **Левина Елена Олеговна**, Хренова М.Г., Астахов А.А., Цирельсон В.Г. (МФТИ, Долгопрудный, Россия; ИНБИ РАН, МГУ и РХТУ, Москва, Россия)
“Влияние электронной делокализации на процесс переноса протона лимитирующей стадии реакции гидролиза цефалоспоринов металло- β -лактамазой”
- С-Б4. **Метелешко Юлия Игоревна**, Немухин А.В., Хренова М.Г. (МГУ, ИБХФ РАН и ИНБИ РАН, Москва, Россия)
“Молекулярное моделирование новых форм белка *iLOV* с измененными спектральными свойствами”

Секция 2. “Квантовая химия элементарных реакций”

- С-Э1. **Акимов Александр Владимирович**, Корчагин Д.В., Ганюшевич Ю.С., Милюков В.А., Мисочко Е. Я. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; ИОХ РАН, Казань, Россия)
“Спектроскопия ЭПР триплетных фосфиниденов – фосфорных аналогов карбенов”
- С-Э2. **Арбузов Артем Андреевич**, Володин А.А., Тарасов Б.П. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Синтез и исследование трехмерных углерод-графеновых структур”
- С-Э3. **Васильев Олег Александрович**, Соломоник В.Г. (ИГХТУ, Иваново, Россия)
“*Ab initio* построение модельных гамильтонианов, описывающих эффекты Яна–Теллера в молекуле тетрафторида ванадия”
- С-Э4. **Володин Алексей Александрович**, Фурсиков П.В., Тарасов Б.П. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Моделирование изотерм сорбции-десорбции в системах сплав–водород по данным электрохимических измерений”
- С-Э5. **Гожилова Инна Олеговна**, Шестаков А.Ф. (ИПХФ РАН и ИФАВ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование оптимального строения наноуглеродных адсорбентов метана из графеновых листов”
- С-Э6. **Григорьев Федор Васильевич**, Сулимов В.Б. (МГУ и ООО «Димонта», Москва, Россия)
“Расчет свободной энергии гидратации молекул в рамках классической континуальной модели”
- С-Э7. **Евсеев Михаил Михайлович**, Башкиров Е.К., Мебель А.М. (Самарский университет, Самара, Россия; Международный университет Флориды, Майами, США)

- “Механизмы образования фенантрена и антрацена при взаимодействии винилацетилена с нафталиновыми радикалами”
- С-Э8. **Коротченко Александр Сергеевич**, Башкиров Е.К., Мебель А.М. (Самарский университет, Самара, Россия; Международный университет Флориды, Майами, США)
“Механизмы образования изохинолина при взаимодействии винилацетилена с радикалом пиридина”
- С-Э9. **Кочетов Николай Евгеньевич**, Акимов А.В., Корчагин Д.В., Юрьева Е.А., Nehr Korn J., Holidack K., Schnegg A., Алдошин С.М. (МГУ, Москва, Россия; ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; National High Magnetic Field Laboratory & Florida State University, Таллахасси, США; Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Берлин, Германия; MPI for Chemical Energy Conversion, Мюльхайм, Германия)
“Сравнительное исследование двух тетраэдрических комплексов кобальта с близкими структурами, но разными магнитными свойствами”
- С-Э10. **Михайлова Татьяна Юрьевна**, Бреславская Н.Н., Зайцева Е.С., Товбин Ю.К., Долин С.П. (ИОНХ РАН, Москва, Россия)
“Зависимость электронных свойств *N*-связанных сегнетоэлектриков семейства KH_2PO_4 (KDP) от природы катиона. Квантово-химическое моделирование”
- С-Э11. **Соловьев Михаил Владимирович**, Зюбин А.С., Зюбина Т.С. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование образования диборана при гидролизе борогидрида магния и его производных. Расчеты и эксперименты”
- С-Э12. **Тарасов Борис Петрович**, Можжухин С.А., Арбузов А.А., Володин А.А., Фурсиков П.В., Лотоцкий М.В., Яртысь А.В. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; Университет Западно-Капской провинции, Кейптаун, ЮАР; Институт энергетических технологий, Челлер, Норвегия)
“Кинетика и механизм гидрирования магния, покрытого Ni-графеновым композитом”

Секция 3. “Строение и превращение органических молекул”

- С-О1. **Бардин Андрей Александрович**, Прохорова Т.Г., Буравов Л.И., Шилов Г.В., Ягубский Э.Б. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Crystal and band structure of new radical cation salt combining conductivity and magnetism $(BEDT-TTF)_2Co^{II}(NCS)_4[K^+(18-crown-6)]$ ”
- С-О2. **Бобков Александр Сергеевич**, Витковская Н.М. (ИГУ, Иркутск, Россия)
“Квантовохимическое исследование внутримолекулярной циклизации [N-(бут-2-ин-1-ил)-пиррол-2-ил]метанола и его алленового изомера”
- С-О3. Волохов В.М., **Зюбина Татьяна Сергеевна**, Зюбин А.С., Амосова Е.С., Волохов А.В., Варламов Д.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое исследование термодинамических свойств перспективных ракетных топлив”
- С-О4. **Жилева Елена Ивановна**, Дричко Н.В., Шилов Г.В., Флакина А.М., Торунцова С.А., Любовская Р.Н. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; Университет Дж. Хопкинса, Балтимор, США)
“Исследование анизотропии электронной структуры в органических проводниках $\theta-D_4[MBr_4](Solvent)$ ”
- С-О5. **Завелев Денис Ефимович**, Цодиков М.В., Жидомиров Г.М. (ИНХС РАН, Москва, Россия; ИК СО РАН, Новосибирск, Россия; ВШЭ, Москва, Россия)

- “Механизмы деоксигенации сложных эфиров на биметаллических Pt-Sn катализаторах: исследование методом DFT”
- C-06. **Игнатъев Владислав Михайлович**, Емельфнова Н.С. (МГУ, Москва, Россия) (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантовохимическое моделирование комплексов сополимера N-винилпирролидона с диметакрилатом триэтиленгликоля с метформинном”
- C-07. **Истакова Ольга Ивановна**, Конев Д.В., Зюбин А.С., Воротынцев М.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; ИГХТУ и МГУ, Москва, Россия; Институт молекулярной химии Университета Бургундии, Дижон, Франция)
“Колебательные спектры олигопорфиновых металлокомплексов. Расчет и эксперимент”
- C-08. **Корчагин Денис Владимирович**, Акимов А.В., Чапышев С.В., Мисочко Е.Я. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Стерическое влияние заместителей на магнитную анизотропию в высокоспиновых полибромфенилнитренах”
- C-09. **Курмаз Владимир Александрович**, Конев Д.В., Курмаз С.В., Гак В.Ю. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Электрохимическое и спектральное поведение гибридных наноструктур тетрафенилпорфирината цинка с амфифильным сополимером N-винилпирролидона: от органических к водно-органическим и водным”
- C-010. **Лобач Анатолий Степанович**, Спицына Н.Г., Дремина Н.Н., Нефедкин С.И., Казаков В.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; МЭИ и “Исследовательский центр имени М.В. Келдыша”, Москва, Россия)
“Синтез графеновых нанолитов эксфолиацией графита в жидкой фазе и исследование их структуры и свойств”
- C-011. **Мартьянов Тимофей Петрович**, Ушаков Е.Н., Кудреватых А.А., Клименко Л.С. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; Югорский государственный университет, Ханты-Мансийск, Россия)
“Оптический молекулярный сенсор для обнаружения цианид-анионов на основе 1-гидроксиантрахинона: синтез, спектроскопические свойства и квантово-химическое моделирование”
- C-012. **Миненков Юрий Валерьевич**, Sharapa D.I., Генаев А.М., Cavallo L. (МФТИ, Москва, Россия; Технологический институт Карлсруэ, Карлсруэ, Германия; НИОХ СО РАН, Новосибирск, Россия; Научно-технологический университет имени короля Абдаллы, Саудовская Аравия)
“Conformational energies from semiempirical and force field computational chemistry methods: fast results but hard-to-predict accuracy”
- C-013. **Невидимов Александр Владимирович** (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; МФТИ, Долгопрудный, Россия)
“Квантово-химическое моделирование спектральных свойств красителя BODIPY с разными заместителями”
- C-014. **Самигулина Зульфия Сабировна**, Борисевич С.С., Хурсан С.Л., Бургарт Я.В., Бажин Д.Н. (УГНТУ и УФИХ УФИЦ РАН, Уфа, Россия; ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование синтеза фторсодержащих конденсированных пиразолов взаимодействием {1-[5-(трифторметил)-1H-пиразол]-3-илиден}гидразина с ортоэфирами”
- C-015. **Спицына Наталья Германовна**, Благов М.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химические расчеты влияния конформации этиленовых групп на спиновое состояние Fe(III) в катионных комплексах saltrien-типа”

- C-016. **Рябов Михаил Алексеевич**, Линко Р.В., Страшнов П.В. (РУДН, Москва, Россия)
“Квантово-химическое моделирование строения и ЭСП молекулярного комплекса 2,4,7-тринитрофенантренхинона с антраценом”

Секция 4. “Квантово-химические расчеты и экспериментальные данные в исследовании электрохимических процессов”

- C-ЭХ1. **Аксенов Дмитрий Александрович**, Федотов С.С., Боев А.О., Жугаевич А., Абакумов А.М., Стивенсон К. (Сколтех, Москва, Россия; БелГУ, Белгород, Россия)
“Квантово-механическое моделирование катодных материалов для литий-, натрий- и калий-ионных аккумуляторов”
- C-ЭХ2. **Байков Юрий Михайлович** (С.-Петербург, Россия)
“Extended outlook on defect conception towards specificity of proton transfer”
- C-ЭХ3. **Баймуратова Гузалия Рафиковна**, Слесаренко А.А., Ярмоленко О.В. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Влияние структуры краун-эфиров на образование SEI в системе жидкий электролит/электрод на примере 15-краун-5, дибензо-18-краун-6 и 3-пентадецил-2,4-диоксо-16-краун-5”
- C-ЭХ13. **Борисевич София Станиславовна**, Евщик Е.Ю., Бушкова О.В., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Оценка анодного потенциала окисления литийсодержащих электролитных систем методами квантовой химии”
- C-ЭХ4. **Васильев Владимир Петрович**, Смирнов В.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Протонная проводимость пленок Нафиона и оксида графена: эффект сухозаряженного аккумулятора”
- C-ЭХ5. **Глухов Александр Александрович**, Укше А.Е., Нечаев Г.В., Бельмесов А.А. (МФТИ, Долгопрудный, Россия; ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Перколяционная модель систем с концентрацией проводящей фазы на межзёрненных границах”
- C-ЭХ6. **Зюбин Александр Сергеевич**, Зюбина Т.С., Сангинов Е.А., Каюмов Р.Р., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Влияния количества пластификатора на энергию взаимодействия ионов в мембранах на основе Нафиона: квантово-химическое моделирование”
- C-ЭХ7. **Зюбин Александр Сергеевич** (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование изменения структуры и свойств водорода при сжатии”
- C-ЭХ8. **Зюбина Татьяна Сергеевна**, Зюбин А.С., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование неводных полимерных электролитов на основе нафиона и наноструктурированных электродов на основе углерода и кремния для Li-ионных аккумуляторов”
- C-ЭХ9. **Колесников Александр Васильевич**, Цыганова И.В. (ЧелГУ, Челябинск, Россия)
“Расчеты кинетических констант разряда катионов в нейтральных и кислых растворах сульфата цинка”
- C-ЭХ10. **Коробов Иван Иванович**, Калинин Г.В., Иванов А.В., Дрёмова Н.Н., Бельмесов А.А., Шилкин С.П. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Коррозия в растворах минеральных кислот тонких пленок Ti-B-N, полученных методом реактивного магнетронного распыления”

- С-ЭХ11. **Наумова Анастасия Сергеевна**, Лепёшкин С.В., Оганов А.Р. (Сколтех, Москва, Россия; МФТИ, Долгопрудный, Россия; ФИАН, Москва, Россия; Северо-Западный Политехнический Университет, Сиань, Китай)
“Углеводороды под давлением: фазовая диаграмма и новые соединения”
- С-ЭХ12. **Новикова Ксения Сергеевна**, Сангинов Е.А., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Исследование модификации мембран Нафион сульфированным сшитым полистиролом”
- С-ЭХ13. **Писарева Анна Владимировна**, Писарев Р.В., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Исследование протонной проводимости в системе на основе паратолуолсульфокислоты и поливинилового спирта”
- С-ЭХ14. **Писарева Анна Владимировна**, Писарев Р.В., Беломоина Н.М., Булычева Е.Г., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия; ИНЭОС РАН, Москва, Россия)
“Протонная проводимость сульфированных полифенилхиноксалинов”
- С-ЭХ15. **Писарева Анна Владимировна**, Шилов Г.В., Писарев Р.В., Карелин А.И., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Синтез и исследование структуры солей м-крезолсульфокислоты с катионами NH_4^+ , K^+ , Rb^+ и Cs^+ методами РСА и колебательной спектроскопии”
- С-ЭХ16. **Сангинов Евгений Александрович**, Зюбина Т.С., Зюбин А.С., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Теоретическое исследование причин необычной зависимости транспортных свойств Нафион/ДМСО от природы щелочного катиона”
- С-ЭХ17. **Толстов Георгий Игоревич**, Загидуллин М.В., Хватов Н.А., Мебель А.М., Медведков Я.А., Аязов В.Н. (Самарский университет, Самара, Россия; СФ ФИАН, Самара, Россия; Международный университет Флориды, Майами, США)
“Константы скорости и коэффициенты ветвления для каналов продуктов реакций электронно-возбужденной молекулы $\text{O}_2(b)$ ”
- С-ЭХ18. **Тулибаева Галия Зайнетдиновна**, Шестаков А.Ф. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование строения различных типов ионных и молекулярных комплексов в электролитной системе LiBF_4 – гамма-бутиролактон”
- С-ЭХ19. **Тулибаева Галия Зайнетдиновна**, Ярмоленко О.В., Шестаков А.Ф. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Теоретическое изучение процесса адсорбции краун-эфиров с различной структурой на поверхности литиевого электрода”
- С-ЭХ20. **Цветков Максим Вадимович**, Зюбин А.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Добровольский Ю.А. (ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое моделирование отщепления молекул водорода от боргидрида натрия в воде”
- С-ЭХ21. **Эркабаев А.М.**, Ярославцева Т.В., Бушкова О.В. (ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия; ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия)
“Квантово-химическое и ИК-спектроскопическое исследование ионной сольватации и ассоциации в системе ацетонитрил – LiCF_3SO_3 ”