

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Ивановский государственный химико-технологический университет
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева
При финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований

ПРОГРАММА
VII Всероссийской конференции
по структуре и энергетике молекул

Посвящается 100-летию со дня рождения
профессора К.С.Краснова

Иваново, 19 – 23 ноября 2018 г.

Программный комитет:

1. Бутман М.Ф., д.ф.-м. н., проф. (ИГХТУ, председатель)
2. Гиричев Г.В., д.х.н., проф. (ИГХТУ, заместитель председателя)
3. Белова Н.В., д.х.н. (ИГХТУ, ученый секретарь)
4. Алиханян А.С., д.х.н., проф. (ИОНХ РАН)
5. Беляков А.В., д.х.н., проф. (СПбГУ)
6. Годунов И.А., д.х.н., проф. (МГУ)
7. Горохов Л.Н., д.х.н., проф. (ОИВТ РАН)
8. Зайцевский А.В., д.ф.-м.н. (МГУ)
9. Ищенко А.А., д.х.н., проф. (МИРЭА-РТУ)
10. Киселев М.Г., д.х.н., проф. (ИХР РАН)
11. Ключев М.В., д.х.н., проф. (ИвГУ)
12. Койфман О.И., д.х.н., проф., чл.-корр. РАН (ИГХТУ)
13. Кудин Л.С., д.х.н., проф. (ИГХТУ)
14. Лопатин С.И., д.х.н., проф. (СПбГУ)
15. Оберхаммер К.-Х. проф. (Университет г. Тюбинген, Германия)
16. Румянцев Е.В., д.х.н. (ИГПУ)
17. Сидоров Л.Н., д.х.н., проф. (МГУ)
18. Соломоник В.Г., д.х.н., проф. (ИГХТУ)
19. Столярова В.Л., д.х.н., проф., чл.-корр. РАН (СПбГУ)
20. Степанов Н.Ф., д.ф.-м.н., проф. (МГУ)
21. Сырбу С.А., д.х.н., проф. (ИвГУ)
22. Тарасов Ю.И., д.ф.-м.н. (МИРЭА-РТУ)
23. Титов А.В., д.ф.-м.н. (НИЦ “Курчатовский институт”)
24. Цирельсон В.Г., д.ф.-м.н., проф. (РХТУ)
25. Шаинян Б.А., д.х.н., проф. (ИрИХ СО РАН)
26. Шишков И.Ф., д.х.н., проф. (МГУ)

Организационный комитет:

1. Шлыков С.А., д.х.н. (ИГХТУ, председатель)
2. Слизнев В.В., д.х.н. (ИГХТУ, заместитель председателя)
3. Барташевич Е.В., д.х.н. (ЮУрГУ)
4. Батаев В.А., к.х.н. (МГУ)
5. Гиричева Н.И., д.х.н. (ИвГУ)
6. Жабанов Ю.А., к.х.н. (ИГХТУ)
7. Пименов О.А., к.х.н. (ИГХТУ)
8. Погонин А.Е., к.х.н. (ИГХТУ)

19 ноября, понедельник

(Главный корпус ИГХТУ, Шереметевский пр., 7, ауд. Г205)

13⁰⁰ – 14⁰⁰ Регистрация участников

14⁰⁰ Открытие конференции

14¹⁰ – 15⁵⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Гиричев Г.В.)

14¹⁵–14³⁰ Бутман М.Ф. (ИГХТУ) *Вступительное слово о профессоре Краснове К.С.*

14³⁰ – 15¹⁰ Слизнев В.В. (ИГХТУ, г. Иваново) «Строение молекул NbX_4 ($X=Cl, Br, I$): квантовая химия и электронография»

15¹⁰–15⁵⁰ Михайлов О.В. (Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань) «DFT-модели молекулярных структур 3d-металлохелатов открытого и замкнутого контуров с (N,N)-, (N,O)- и (N,S)- лигандами и сочленёнными хелатными циклами»

15⁵⁰ – 16¹⁰ Перерыв

16²⁰ – 17⁴⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Цирельсон В.Г.)

16¹⁰ – 16⁵⁰ Годунов И.А. (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва) «Строение и динамика молекул оксалилгалогенидов в возбужденных электронных состояниях»

16⁵⁰ – 17²⁰ Тарасов Ю.И., Кочкиков И.В. (МИРЭА-Российский технологический университет, МГУ, г. Москва) «Строение и внутримолекулярная динамика нежестких молекул. Сочетание квантово-химических и экспериментальных методов исследования»

17²⁰ – 17⁴⁰ Перерыв

Устные доклады (15 мин., включая вопросы).

17⁴⁰ – 18⁴⁰ **Устные доклады.** (Председатель)

1. Toshev N.A., Cheshmedzhieva D., Dudev T. DFT study of interactions between hydroxamic acids and histone deacetylases
2. Вовна В.И., Шурыгин А.В., Короченцев В.В. Электронная структура и оптические свойства ряда аддуктов хелатных комплексов РЗЭ
3. Белов К.В., Ходов И.А., Ефимов С.В., Батиста де Карвальо Л.А.Е. Изучение конформационного многообразия мефенаминовой кислоты методами спектроскопии ЯМР и квантовохимических расчетов
4. Денисик М.Г., Матулис В.Э. Стандартные энтальпии образования в газовой фазе производных тетразола и триазолов. Квантовохимические расчеты

18⁴⁵ Приветственный ужин (фуршет)

20 ноября, вторник

(Главный корпус ИГХТУ, Шереметевский пр., 7, ауд. Г205)

9³⁰–10¹⁰ 9³⁰–10⁵⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Годунов И.А.)
9³⁰–10¹⁰ Батаев В.А. (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва) «Кинематическая ангармоничность колебаний нежестких молекул»

10¹⁰–10⁵⁰ Оберхаммер К.-Х. (Университет г. Тюбинген, (Германия)) «Theory and practice of gas-phase electron diffraction»

10⁵⁰–11¹⁰ Перерыв

11¹⁰–11⁵⁰ 11¹⁰–12³⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Зайцевский А.В.)
11¹⁰–11⁵⁰ Цирельсон В.Г. (РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва) «Квантово-топологическая теория молекулярной структуры: факты и мифы»

11⁵⁰–12³⁰ Соломоник В.Г. (ИГХТУ, г. Иваново) «Неадиабатические и релятивистские эффекты в спектрах молекул, содержащих атомы *d* и *f* элементов»

12³⁰–14⁰⁰ Обед

Устные доклады (15 мин., включая вопросы).

- 14⁰⁰–15¹⁵ **Устные доклады** (Председатель Барташевич Е.В.)
1. Голосная М.Н., Никитина Н.А., Пичугина Д.А., Кузьменко Н.Е. Изучение механизма V-Ti катализаторов в реакции дегидрирования пропана
 2. Козлов С.В. Диабатическое представление как альтернативный метод описания взаимодействующих состояний одной симметрии
 3. Сидорин А.Е., Тихонов С.А. Фотоэлектронные спектры и электронная структура борфторидных комплексов дипирролилметена с органическими заместителями
 4. Краснощёков С.В. Сопоставление фундаментальных колебательных частот, рассчитанных методами операторной теории возмущений Ван Флека и колебательного самосогласованного поля
 5. Краснощёков С.В., Степанов Н.Ф., Чан С., Бехтерева Е.С., Улеников О.Н. Лестничные операторы осциллятора Морзе и перспективы их использования для моделирования колебаний молекул

15¹⁵–15³⁵ Перерыв

15³⁵ – 16³⁵ *Устные доклады (Председатель Лопатин С.И.)*

1. Митин А.В. Коллективные взаимодействия атомов и энергетика биомолекул
2. О.А.Pimenov, R.J.F.Berger, V.V.Sliznev The some cases of metallophilic interaction in the gas phase
3. Наваркин И.С., Соломоник В.Г., Смирнов А.Н. Неэмпирическое исследование молекулы дифторида меди в основном и низших возбужденных электронных состояниях
4. Васильев О.А., Соломоник В.Г. Вибронные взаимодействия в молекуле CeCl_3

16³⁵ – 16⁵⁵ Перерыв

17¹⁰ – 18⁰⁰ *Устные доклады (Председатель Шлыков С.А.)*

1. Тихонов С.А., Федоренко Е.В., Мирочник А.Г., Осьмушко И.С., Скитневская А.Д., Трофимов А.Б., Вовна В.И. Электронная структура и люминесценция изомерных ацетилнафтолятов дифторида бора
2. Гамов Г.А. Конформации аниона гидразона, образованного пиридоксаль-5-фосфатом и изониазидом
3. Поддубный В.В., Козлов М.И. Влияние движения лютеина на нефотохимическое тушение флуоресценции в комплексе ЛНСII растений

21 ноября, среда

(Главный корпус ИГХТУ, Шереметевский пр., 7, ауд. Г205)

9³⁰–10¹⁰ 9³⁰–10⁵⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Тарасов Ю.И.)
9³⁰–10¹⁰ Туровцев В.В. (Тверской государственный медицинский университет, г. Тверь) «Расчёт термодинамических свойств нежестких молекул»

10¹⁰–10⁵⁰ Шлыков С.А. (ИГХТУ, г. Иваново) «Конформационные свойства и молекулярная структура циклических шестичленных гетероатомных соединений»

10⁵⁰–11¹⁰ Перерыв

11¹⁰–12³⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Новосадов Б.К.)
11¹⁰–11⁵⁰ Хренова М.Г. (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва) «Взаимосвязь ключевых взаимодействий в активных центрах ферментов и макроскопических свойств при гидролизе цефалоспориновых антибиотиков металло-β-лактамазой»

11⁵⁰–12³⁰ Зайцевский А.В. (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва) «Моделирование возбужденных электронных состояний молекул релятивистским методом связанных кластеров: новые перспективы»

12³⁰–14⁰⁰ Обед

Устные доклады. Стендовая сессия.

14⁰⁰–15⁰⁰ **Устные доклады** (Председатель Митин А.В.)

1. Кудрин А.В., Зайцевский А.В., Исаев Т.А. Моделирование квазизамкнутых циклов оптических переходов в молекулах соединений тяжёлых элементов
2. Новосадов Б.К. Новое представление о структуре вращательно-колебательного спектра свободной системы частиц
3. Олейниченко А.В., Зайцевский А.В., Элиав Э. Развитие релятивистского метода связанных кластеров для электронных состояний с несколькими открытыми оболочками
4. Смирнов А.Н., Соломоник В.Г. Высокоточное описание свойств соединений трансурановых элементов методами квантовой химии: молекулы AmO и AmO⁺

15⁰⁰–15²⁰ Перерыв

15²⁰– 16³⁵ *Устные доклады (Председатель Слизнев В.В.)*

1. Терентьев Р.В., Годунов И.А., Маслов Д.В., Яковлев Н.Н., Батаев В.А., Абраменков А.В. Спектры возбуждения флуоресценции и строение молекулы 2-метилпропаналя в S_1 возбужденном электронном состоянии
2. Жабанов Ю.А. Строение и энергетика расширенных макрогетероциклов, перспективных для использования в МО CVD технологиях
3. Колесникова И.Н., Рыков А.Н., Шишков И. Ф. Теоретическое и экспериментальное исследование структуры молекул 2-гидрокситиобензамида и стрептоцида в газовой фазе
4. Мальцев М.А., Морозов И.В., Осина Е.Л. Термодинамические функции двухатомных соединения аргона
5. Шлыков С. А., Кузьмина Л. Е., Чан Динь Фиен. Конформационные свойства и молекулярная структура кремнийорганических соединений

17⁰⁰– 19⁰⁰ *Стеновая сессия*

1. Бормотова Е.А. Неадиабатический анализ спин-орбитальных $A^1\Sigma^+$ - $b^3\Pi$ и $D^1\Pi$ - $d^3\Pi$ комплексов молекулы LiRb на основе неэмпирических расчётов электронной структуры
2. Краснощёков С.В. Расчет ангармонических колебаний молекулы диборана методом операторной теории возмущений четвертого порядка
3. Краснощёков С.В. Степанов Н.Ф. Программное обеспечение расчетов ангармонических колебательных состояний многоатомных молекул с помощью численно-аналитической реализации операторной теории возмущений Ван Флека
4. Медведев А. А. Неэмпирическое моделирование спектральных, радиационных и термодинамических характеристик смесей Rb-Ar и Cs-Ar
5. Медведев А. А., Бормотова Е. А., Козлов С. В. Влияние релятивистских эффектов на радиационные свойства возбуждённых электронных состояний LiRb и LiCs
6. Волкова Т.Г., Таланова И.О. Водородные связи N–H---O в молекулярных кристаллах аминокислот
7. Курочкин И.Ю., Краснов А.В., Погонин А.Е., Киселёв А.Н. Термодинамика процесса сублимации 5,10,15,20-тетраakis(4'-фторфенил) порфина
8. Тюнина В.В., Краснов А.В., Гиричев Г.В., Дунаев А.М Исследование термодинамики сублимации L-пролина и его гидроксипроизводных
9. Поляев А.В. Получение потенциальных кривых и матричных элементов спин-орбитального взаимодействия для состояний $A^1\Sigma$ и $b^3\Pi$ молекулы K_2
10. Родин Е.А., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Фомина Л.В. Метод нахождения переходных состояний при скелетных трансформациях циклооктотетраена
11. Сидорин А.Е., Тихонов С.А. , Самойлов И.С., Борисенко А.В., Вовна В.И. фотоэлектронные спектры и электронная структура формазанатов бора с ароматическими заместителями

12. Тихонов С.А., Самойлов И.С., Крауклис И.В., Свистунова И.В., Вовна В.И. Электронная структура и спектры поглощения γ -замещенных ацетилацетонатов дифторида бора
13. Отлёттов А.А., Гиричев Г.В. Эффекты C–C и C–N сверхсопряжения в молекуле аценафтена по данным NBO-анализа
14. Д. Б. Каюмова, И. П. Малкерова, С.Н. Мамонтова, Н.Н. Камкин, М. А. Шмелев, А.А. Сидоров, А. С. Алиханян. Термодинамика парообразования фенантролинового комплекса пивалата кадмия $Cd_2Piv_4Phen_2$
15. Бубнова К. Е., Гиричева Н. И., Федоров М. С., Сырбу С. А., Гиричев Г. В. Ядерная динамика водородосвязанных комплексов разной природы
16. Бубнова К. Е., Гиричева Н. И., Федоров М. С., Сырбу С. А., Гиричев Г. В. ИК-спектры системы пара-Н-додецилоксибензойная кислота - ее пиридиновый эфир при различных концентрациях компонентов
17. Веретенников В.В., Мерлян А.П., Отлёттов А.А., Жабанов Ю.А. Молекулярная структура и ароматичность триадиазол-аннелированного гемигексафиазина и гетероазапорфириноида
18. Мерлян А.П., Веретенников В.В. Молекулярная структура дикарбагемипорфиризинатов никеля и цинка по данным DFT-расчетов
19. Слизнев В.В., Пименов О.А. Строение молекулы MoF_5 : эффект Яна-Теллера и спин-орбитальное взаимодействие
20. Слизнев В.В., Смородин С.В. Теоретическое исследование эффекта Яна-Теллера в молекулах $NbBr_4$ и NbI_4
21. Воеводина Е.А., Белова Н.В., Слизнев В.В. Конформационные свойства молекулы 4-метилпиридин-N-оксида с VF_3 ($VF_3-PyO-CH_3$)
22. Королюкова К.А., Белова Н.В., Пименов О.А. Геометрическое строение пиразолонатного комплекса тербия по результатам DFT расчетов
23. Котова В.Е., Белова Н.В., Пименов О.А. Геометрическое строение пиразолонатного комплекса неодима по результатам DFT расчетов
24. Ворожцов В.А., Столярова В.Л., Лопатин С.И. Термодинамические свойства гафнатов редкоземельных металлов при высоких температурах: масс-спектрометрическое исследование
25. Иваненко И.П., Краснощеков С.В., Павликов А.В. Анализ колебательных спектров карбиноподобной углеродной пленки, синтезированной импульсно-плазменным методом
26. Пулин В.Ф., Суринская Т. Ю., Рыжова Е. В. Квантово-химические модели сопряжённо-циклических соединений
27. Пулин В.Ф., Суринская Т. Ю., Рыжова Е. В. Структурно-динамические модели шестичленных циклических соединений
28. Васильев Н.А., Воронин А.П., Суров А.О. Конформации катиона ципрофлоксацина: газофазные расчёты и экспериментальные кристаллические структуры
29. Пулин В.Ф., Суринская Т. Ю., Рыжова Е. В. Структурно-динамические модели флавоноидов
30. Агеев Г.Г., Хайкин Л.С., Кочиков И.В., Рыков А.Н., Грикина О.Е., Шишков И.Ф. Изучение структуры молекул 1,2-дипропилдиазиридина и 1,2,3-триэтилдиазиридина в газовой фазе

*Стендовая сессия IX Всероссийской молодежной школы-конференции
“Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность
органических и неорганических молекул”*

31. Бойцов Д.Е., Воронин А.П., Манин А.Н. Сравнительная оценка теоретических подходов к определению энергии кристаллической решётки сульфаниламида относительно экспериментальной энтальпии сублимации
32. Болотова У.А., Люткин А.С., Орлов В.Ю., Цивов А.В. Исследование взаимодействия гетероатомных фенолов с галогензамещенными бензолами методами квантовой химии
33. Бочаров П.С., Ксенофонтов А.А., Антина Е.В. Исследование комплексообразования BODIPY с бычьим сывороточным альбумином с использованием молекулярного докинга
34. Бумбина Н.В., Смирнова А.И., Акопова О.Б., Жарникова Н.В., Усольцева Н.В. Моделирование и прогноз мезоморфизма поликатенарных соединений, содержащих азогруппу и фрагмент галловой кислоты
35. Вирзум Л.В., Крылов Е.Н. Относительная нуклеофильность замещенных пиридин-оксидов как функция квантово-химических параметров атома кислорода
36. Волкова Т.Г., Таланова И.О. Водородные связи в молекулярных кристаллах α -амино- β -параоксифенилпропионовой кислоты
37. Гиричева М.А., Гущин А.В. Особенности геометрического и электронного строения органических производных сурьмы и висмута с салициловой и ацетилсалициловой кислотами
38. Голованов И.С., Сухоруков А.Ю. Изучение процесса циклотримеризации оксимов
39. Грязева (Соколова) Т.Д., Люткин А.С., Орлов В.Ю., Цивов А.В. Исследование формирования диариловых эфиров в реакциях S_NAr методами квантовой химии
40. Гурина Д.Л., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е. Ab initio молекулярно-динамическое моделирование П-кумаровой, сиреневой и галловой кислот в среде модифицированного сверхкритического диоксида углерода
41. Ершова А.О., Федоров М.С. Расчет термодинамических характеристик газофазного депротонирования аминзамещенных ароматических сульфокислот
42. Захаров С.В., Авдошин А.А., Наумов В.С., Игнатов С.К. Диффузионные свойства аморфного полилактида. молекулярно- динамическое исследование
43. Иванова К.А., Комендантова А.С., Менчиков Л.Г., Волкова Ю.А., Заварзин И.В. Изучение механизма образования пиридазинов из β -хлорвинилальдегидов и тиогидразидов оксаминовых кислот
44. Игнатова А.В., Иванов С.Н., Федоров М.С. Исследование протондонорных свойств дикарбоновых и дисульфоновых кислот бензола
45. Калмыков П.А., Лысенко А.А., Магдалинова Н.А., Ключев М.В. Квантово-химическое моделирование адсорбции молекулы CCl_4 на кластере Pd_{13}

46. Крылов Е.Н. Позиционная селективность реакции нуклеофильного присоединения аниона ацетона к 1-метоксиаллену: квантово-химический анализ
47. Ксенофонтов А.А., Бочаров П.С., Антипа Е.В. Квантово-химическое исследование супрамолекулярного комплексообразования бис(дипиррометенатов) цинка(II) с фуросемидом
48. Кузнецова А.С., Исляйкин М.К. Изучение изомеров камфоразамещенного дитриазолдиизоиндолмакрогетероцикла методом DFT
49. Кузнецова А.С., Исляйкин М.К. Геометрическое и электронное строение дикарбагемипорфиразина с камфорапиразиновыми фрагментами по данным метода DFT
50. Лебедев И.С., Бубнова К.Е., Гиричева Н.И., Фёдоров М.С., Филиппов И.А. Исследование структурной организации системы на основе азобензола и П-Н-пропилоксикоричной кислоты
51. Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Гурина Д.Л., Тихонов Н.С., Петренко В.Е. Селективная сольватация изомеров гидроксид- и дигидроксидбензойной кислот в модифицированном сверхкритическом диоксиде углерода. Численный эксперимент
52. Отлётов А.А., Киселев А.Н., Курочкин И.Ю., Погонин А.Е. Влияние природы периферийного галогена-заместителя на ароматичность 5,10,15,20-тетракис(4'-галогенфенил)порфина
53. Отлётов А.А., Веретенников В.В., Мерлян А.П., Жабанов Ю.А. Молекулярная структура и ароматичность тиадиазол-аннелированного гемигексапиразина и гетероазапориноида
54. Погонин А.Е., Курочкин И.Ю., Отлётов А.А., Киселёв А.Н. Особенности ИК-спектров 5,10,15,20-тетракис(4'-галогенфенил)порфинов
55. Пыхова А.Д., Иоффе И.Н. Структурные и электронные свойства CF_2 -производных эндодрального фуллерена $Sc_3N@C_{80}$
56. Разрядов А.А., Кузнецова А.С., Исляйкин М.К. Особенности строения 2,15(16)- бис(метоксиэтокси)дикарбагемипорфиразинов по данным метода DFT
57. Солдатова К.М., Гиричева Н.И., Смирнова А.И., Усольцева Н.В. Геометрическое и электронное строение смешанно-замещенных порфиринов A_3B -типа
58. Сорокина М.С., Соловьев М.Е. Квантово-химическое моделирование присоединения кислорода к алкильным радикалам октадиена и метиллинолеата
59. Сулейманова Д.С., Кочетова Л.Б. Квантово-химическое моделирование механизма газофазной реакции глицилглицина с бензолсульфонилхлоридом
60. Троицкая Д.Е., Кочетова Л.Б., Кустова Т.П. Квантово-химическое исследование механизма реакции аренсульфонилирования вторичных жирноароматических аминов
61. Тулибаева Г.З., Ярмоленко О.В., Шестаков А.Ф. Теоретическое изучение процесса адсорбции краун-эфиров различной структуры на поверхности углерода

62. Тюнина В.В., Дунаев А.М. Межмолекулярные взаимодействия в системе пиридинкарбонная кислота – метионин по данным квантово-химических расчетов
63. Федорова И.В., Крестьянинов М.А., Сафонова Л.П. Ab initio изучение структуры и устойчивости различных комплексов на основе алкиламмониевого катиона
64. Федорова И.В., Сафонова Л.П. Анализ квантово-химических методов расчета при изучении структурных и энергетических характеристик ионных пар с катионом триэтаноламмония
65. Tran Dinh Phien, Shlykov S. A. Molecular structure of 1-phenyl-1-RO-silacyclohexanes (R=H, CH₃) by gas-phase electron diffraction and theoretical calculations
66. Филиппова Я.Е., Иванов Е.Н., Исляйкин М.К. Особенности строения замещенного моноидгемигексафиазина АВАВАВ'-типа по данным метода DFT
67. Чичерин К.А., Волкова Т.Г. Валентные и деформационные колебания N-H связи в 3,5 – диметилпиразоле

22 ноября, четверг

(Главный корпус ИГХТУ, Шереметевский пр., 7, ауд. Г205)

9³⁰–10⁵⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Соломоник В.Г.)
9³⁰–10¹⁰ Столярова В.Л. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург) «Термодинамика высокотемпературных химических реакций в материаловедении и экологии»

10¹⁰–10⁵⁰ Кудин Л.С. (ИГХТУ, г. Иваново) «Высокотемпературная масс-спектрометрия в ИГХТУ»

10⁵⁰–11¹⁰ Перерыв

11¹⁰–12³⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Краснощеков С.В.)
11¹⁰–11⁵⁰ Новаковская Ю.В. (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва) «Особенности коллективных движений в водородно-связанных системах»

11⁵⁰–12³⁰ Шугуров С.М. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург) «Неорганические ассоциаты в газовой фазе»

12³⁰–14⁰⁰ Обед

14⁰⁰–15²⁰ **Пленарные доклады.** (Председатель Столярова В.Л.)
14⁰⁰–14⁴⁰ Лопатин С.И. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург) «Термодинамические свойства систем ВаО-СеО₂ и СеО₂-ZrO₂ по данным высокотемпературной масс-спектрометрии»

14⁴⁰–15²⁰ Гиричев Г.В. (ИГХТУ, г. Иваново) «Высокотемпературная газовая электронография в ИГХТУ»

15²⁰–15⁴⁰ Перерыв

Устные доклады.

- 15⁴⁰–16⁴⁰ **Устные доклады** (Председатель Новаковская Ю.В.)
1. Грибченкова Н.А., Сморгачев К.Г., Колмаков А.Г., Алиханян А.С. Термодинамика гетерогенных равновесий в системе Al₂O₃—MgO при 1900 К
 2. Дунаев А.М., Моталов В.Б., Говоров Д.Н., Кудин Л.С. Состав пара ионных жидкостей на основе алкилимидазолия с фторсодержащими анионами
 3. Морозова Е.А., Столяров И.П., Малкерова И.П., Хорошилов А.В., Алиханян А.С. Пивалаты меди(I) и палладия(II): строение молекул в газовой фазе и термодинамические характеристики процессов с их участием

4. Говоров Д.Н., Кудин Л.С., Дунаев А.М. Применение композитных методов квантовой химии к вычислению энтальпии образования катионов ионных жидкостей состава C_nMIm ($n = 2, 4, 6$)

16⁴⁰ – 17⁰⁰ Перерыв

17⁰⁰ – 18⁰⁰ *Устные доклады (Председатель Кудин Л.С.)*

1. Парамонов Н.А., Новаковская Ю.В. Полуклассическая динамика модельных систем: применение гауссовых волновых пакетов
2. Кузьмин Н.А., Дунаев А.М., Моталов В.Б., Кудин Л.С. Исследование испарения фотохромных материалов на основе спиропиранов методом масс-спектрометрии Кнудсена
3. Краилов А.А., Дунаев А.М., Кудин Л.С. Автоматизация процесса ионизации молекул электронами для масс-спектрометрической установки при помощи программируемого источника питания

18⁰⁰ Подведение итогов. Закрытие конференции.

Банкет

23 ноября, пятница

Экскурсия в г. Палех в новый музейно-выставочный комплекс (8:00 – 16:00) .

Посещение научных лабораторий ИГХТУ и дискуссии по тематике конференции (10:00 – 16:00).