

		Конференция	Школа
15 сентября (Понедельник)	12.00-14.00	Регистрация	
	14.00-14.15	Открытие	
	14.15-16.15	Пленарная сессия (актовый зал ИГХТУ)	
	16.15-16.30	<i>Кофе</i>	
	16.30-17.30	Секционное заседание (актовый зал ИГХТУ)	Лекционное заседание (ИГХТУ)
	18.00	<i>Вечер встречи</i>	
16 сентября (Вторник)	9.00-9.30	Пленарная сессия (Парус Зал 1)	Доклад спонсора «Техноинфо» (конференц-зал Манчестер)
	9.30-10.30		Лекционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	10.30-10.45	<i>Кофе</i>	
	10.45-12.15	Секционное заседание Секция 3 – (Парус Зал 1) Секция 2 – (Парус Зал 2)	
	10.45-11.45		Лекционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	12.15-14.00	<i>Обед</i>	
	11.45-14.00		<i>Обед</i>
	14.00-15.00	Секционное заседание Секция 1 – (Парус Зал 1) Секция 2 – (Парус Зал 2)	Лекционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	15.00-16.00		Секционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	16.00-16.15	<i>Кофе</i>	
	16.15-18.00	Секционное заседание Секция 1 – (Парус Зал 1) Секция 2 – (Парус Зал 2)	
	17.00-17.45		Мастер-классы по группам (ИХР РАН)
17 сентября (Среда)	9.00-9.30	<i>Экскурсия</i>	Флэш-доклады (ИХР РАН)
	9.30-10.30		Лекционное заседание (ИХР РАН)
	10.30-10.45		<i>Кофе</i>
	10.45-12.15		Семинар 1 (ИХР РАН)
	12.15-13.15		<i>Обед</i>

	13.15-14.45		Семинар 2 (ИХР РАН)
	14.45-15.00		<i>Кофе</i>
	15.00-16.30		Семинар 3 (ИХР РАН)
	9.00-16.30		Стендовая сессия (ИХР РАН)

18 сентября (Четверг)	9.00-9.30	Пленарная сессия (Парус Зал 1)	Пленарная сессия (Парус Зал 1)
	9.30-10.30		Лекционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	10.30-10.45		<i>Кофе</i>
	10.45-12.45	Стендовая сессия (Парус Зал 2)	
	10.45-11.45		Лекционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	12.45-14.00	<i>Обед</i>	
	11.45-14.00		<i>Обед</i>
	14.00-15.00	Мастер класс (ИГХТУ)	Лекционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	15.00-16.00		Секционное заседание (конференц-зал Манчестер)
	17.00-17.45		Мастер-классы по группам (ИХР РАН)

19 сентября (Пятница)	9.30-10.30	Пленарная сессия конференции (Парус Зал 1)	Лекционное заседание (Парус Зал 2)
	10.30-10.45		<i>Кофе</i>
	10.45-12.30	Секционное заседание Секция 3 – (Парус Зал 1)	
	10.45-11.45		Лекционное заседание (Парус Зал 2)
	11.45-12.30		<i>Обед</i>
	12.30	Заккрытие конференции и подведение итогов школы (Парус Зал 1)	
	14.00-16.00		Лекционное заседание (ИХР РАН)
	16.00-16.45		Мастер-классы по группам (ИХР РАН)

15 сентября

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Актальный зал ИГХТУ (банка) Председатель: Н.Ж. Мамардашвили

- 14.15 – 14.45 Академик РАН Л.Б. Бойнович (*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина, Москва*) Два пути формирования инея на поверхностях с различным смачиванием: новые подходы и нерешенные вопросы
- 14.45 – 15.15 А.В. Чертович (*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва*) Кристаллизация в полимерных системах и влияние зацеплений на структуру и деформацию полимерных материалов
- 15.15 – 15.45 В.А. Блатов (*Самарский государственный технический университет, Самара*) Моделирование кристаллоструктурных трансформаций топологическими методами
- 15.45– 16.15 Цзя Мэнцзю (*Пекинский химико-технологический университет, Пекин, Китай*) Получение углеродных материалов на основе биомассы и их применение в натрий-ионных батареях

16.15-16.30 Кофе

15 сентября

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (16.30-17.30)

Актальный зал ИГХТУ (банка) Председатель: Н.Ж. Мамардашвили

1. Самсонов В.М., Васильев С.А., Талызин И.В. (*Тверь*) Плавление и кристаллизация металлических наночастиц: молекулярно-динамическое моделирование.
2. Коморников В.А., Матвеева Д.С., Гудыменко А.В., Новикова Н.Е., Тимаков И.С., Волошин А.Э. (*Москва*) Кристаллы комплексных хлоридов меди, никеля и кобальта для применения в качестве селективных оптических фильтров
3. Дрозд К.В., Манин А.Н. (*Иваново*) Полиморфизм и многокомпонентные кристаллы ипрониазида
4. Ольхов А.А., Тертышная Ю.В., Бемов Д.Н., Хан О.И., Курносов А.С., Додина Е.П., Иорданский А.Л. (*Москва, Кимры*) Надмолекулярная структура ультратонких волокон на основе кристаллизующихся полимеров, полученных электроформованием

16 сентября

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: Г.Л. Перлович

- 09.00 – 09.30** **М.И. Ягофаров** (*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань*) Новые подходы к исследованию термодинамики плавления органических неэлектролитов
- 09.30 – 10.00** **А.Н. Манин** (*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново*) Особенности применения виртуальных и экспериментальных методов скрининга многокомпонентных кристаллов
- 10.00 – 10.30** **А.М. Vishnyakov** (*Aramco Innovations, Department of Physics, Moscow State University, Moscow*) Coarse-grained simulations of asphaltene precipitation from crude oil: from colloid solution to semi-crystalline bitumen
- 10.30-10.45 Кофе**

16 сентября

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (10.45-12.15)

Секция 2 ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: М.И. Ягофаров

1. **Вильченко С.А., Ким Е.Л., Грибко В.В.** (*Нижний Новгород*) Выращивание кристаллов L-аргинин фосфата из водных растворов
2. **Богачев Н.А., Бетина А.А., Причислый К.С., Петрова А.Л., Зимарина Ю.П.** (*Санкт-Петербург*) Синтез, морфология и люминесценция наночастиц на основе фторидов редкоземельных элементов $KM_{1-x}Eu_xF_4$ ($M = Y, Gd; x = 0 - 1$) и $Rb(Gd_{1-x}Eu_x)_3F_{10}$ ($x = 0 - 1$)
3. **Александрова Д.Д., Семенов В.С.** (*Санкт-Петербург*) Промышленный синтез монокристаллов бифталата рубидия для изготовления кристалл анализаторов
4. **Агафонов А.В., Носков А.В., Алексеева О.В., Гусейнов С.С.** (*Иваново*) Термическое поведение пленочных композитов полистирол/галлуазит. Анализ методом Фримена-Кэрла
5. **Федоров К.А., Федорова И.В., Сафонова Л.П.** (*Иваново*) Прогнозирование фазового поведения жидкость-кристалл для солей алкиламмония с помощью QSPR-моделей на основе квантово-химических данных
6. **Баско А.В., Лебедева Т.Н., Почивалов К.В., Легков С.А., Костина Ю.В.** (*Иваново, Москва*) Особенности кристаллизации и плавления смесей полиэтиленоксида с тимолом: образование полимерных сокристаллов

16 сентября
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (10.45-12.15)

Секция 3 ЗАЛ 2 (Парус) Председатель: А.Н. Манин

1. **Никитина М.Г., Терехова И.В. (Иваново)** Гидрогелиевые композиции на основе йота-каррагинана с содержанием метотрексата и плуроника F127
2. **Желтикова Д.Я., Лосев Е.А. (Новосибирск)** Темплатная кристаллизация клатратов тригональной формы карбамазепина
3. **Бойцов Д.Е., Дрозд К.В., Манин А.Н. (Иваново)** Получение и исследование физико-химических свойств сокристаллов карбамазепина с сульфаниламидами
4. **Агафонов М.А., Никитина М.Г., Терехова И.В. (Иваново)** Разработка «умных» систем доставки лефлуномида на основе бинарных гидрогелей плуроников
5. **Гарибян А.А., Делягина Е.С., Терехова И.В. (Иваново)** Закономерности импрегнирования финголимода в металл-органические каркасы на основе γ -циклодекстрина
6. **Usol'tseva N.V., Nikitin K.S., Smirnova A.I., Akopova O.B., Antina L.A., Zharnikova N.V., Bumbina N.V. (Ivanovo)** Supramolecular organization and photophysical properties of star-shaped tristriazolotriazines

16 сентября
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (14.00-16.00)

Секция 1 ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: В.А. Блатов

1. **Богдан Т.В., Машенко Н.В., Коклин А.Е., Богдан В.И. (Москва)** Кристаллизация гетерогенного катализатора CaSnO_3 в условиях химических реакций
2. **Матвеева Д.С., Коморников В.А., Сорокина Н.И., Волошин А.Э. (Москва)** Смешанные кристаллы на основе простых хлоридов кобальта (II) и никеля (II)
3. **Анисимов С.С., Гребенев В.В. (Москва)** Выращивание кристаллов ТГС ускоренным методом
4. **Гулина Л.Б., Мельничук Е.Ю., Петров А.В., Мурин И.В. (Санкт-Петербург)** Межфазная кристаллизация фторидов металлов на границе раздела раствор соли - фтористый водород
5. **Козлова Н.Н., Сорокина Н.И., Сидорова Е.В., Маноменова В.Л., Синько А.С. (Москва)** Рост, структура и некоторые свойства кристалла гидротартрата гуанилмочевины
6. **Тарарушкин Е.В., Смирнов Г.С. (Москва)** Подтверждение эпитаксиального роста таумасита на поверхности этtringита методами атомистического моделирования
7. **Славнов Т.Д., Блатова О.А., Блатов В.А. (Самара)** Топологический анализ фазовых переходов в интерметаллических соединениях
8. **Соколов А.А., Ягофаров М.И. (Казань)** Взаимосвязь между изменениями энтальпии и объёма при плавлении органических неэлектролитов

16 сентября
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (14.00-16.00)

Секция 2 ЗАЛ 2 (Парус) Председатель: Н.А. Сироткин

1. **Курилов А.Д., Губарева А.В., Зубков С.А. (Москва)** Кинетика агрегации и электрофизические свойства магнитных жидкостей на основе трансформаторного масла
2. **Севрюкова А.Н., Чупрунов Е.В., Ким Е.Л., Наумов А.А., Грибко В.В., Прохоров А.П. (Нижний Новгород)** Применение методики оценки пригодности конструкционных материалов для повышения качества кристаллов KDP, выращенных скоростным методом
3. **Ломакина Т.Е., Конаков В.Г. (Санкт-Петербург)** Исследование тепловых эффектов кристаллизации из ксерогелей твердых растворов полностью стабилизированного ZrO_2 , допированного оксидами лантаноидов
4. **Овчинников Н.Л., Бутман М.Ф., Виноградов Н.М., Морозов Д.В., Гордина Н.Е. (Иваново)** Особенности кристаллизации TiO_2 в гидротермальном биотемплантном синтезе
5. **Пермякова А.Е., Остроушко А.А. (Екатеринбург)** Влияние природы органического компонента на морфологию сложнооксидных материалов и наноконпозиций, полученных в реакциях горения
6. **Быков А.В., Шестимерова Т.А., Гончаренко В.Е., Шевельков А.В. (Москва)** Выбор условий кристаллизации для настройки анионной подструктуры органо-неорганических галогенометаллатов (III)
7. **Кравченко А.С., Данилов Ю.А., Вихрова О.В., Здоровейцев Д.А., Крюков Р.Н., Лесников В.П., Нежданов А.В. (Нижний Новгород)** Исследование свойств углеродных слоев, легированных железом
8. **Сороколетова Н.А., Арсентьев С.С., Серебров Е.И., Беляев С.Н., Белов Д.В. (Нижний Новгород)** Синтез и исследование полуорганических кристаллов двойных солей гуанидина-цинка с нелинейно-оптическими свойствами

16 сентября
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (16.15-18.00)

Секция 1 ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: А.М. Вишняков

1. **Блатова О.А. (Самара)** Структурно-топологические корреляции и моделирование новых кристаллических фаз в интерметаллических системах
2. **Пуйтов В.В., Талызин И.В., Самсонова И.В., Самсонов В.М. (Тверь)** Молекулярно-динамические модели формирования монометаллических, бинарных и тернарных нанокристаллов с использованием коалесценции и спекания
3. **Жигунов Д.В., Луцай А.В., Романов А.А., Пуйтов В.В., Талызин И.В., Самсонов В.М. (Тверь)** Сегрегация компонентов при кристаллизации бинарных металлических наночастиц: молекулярно-динамическое моделирование
4. **Грибко В.В., Вильченко С.А. (Нижний Новгород)** Рост кристаллов дигидрофосфата калия в присутствии EDTA

5. **Егоров Г.И., Круглякова А.А., Никитин М.Е.** (Иваново) Барические свойства глицериновых смесей и кристаллизация льда
6. **Vishnyakov A., Tsygankov D., Trusov E.** (Moscow) Simulation of surfactant-mediated interactions between solid surfaces
7. **Ивлев А.А., Кадцын Е.Д.** (Новосибирск) Молекулярно-динамическое исследования влияния растворителя на строение осаждаемой твердой формы противоопухолевого препарата тековиримата

16 сентября
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (16.15-18.00)

Секция 2 ЗАЛ 2 (Парус) Председатель: К.В. Почивалов

1. **Лебедева Т.Н., Новиков И.В., Баско А.В., Почивалов К.В.** (Иваново) Термическое поведение смесей полиамидов-12 различной молекулярной массы с N-метилпирролидоном
2. **Сибирев Н.В., Сошников И.П., Илькин И.В., Убийвовк Е.В., Штром И.В.** (Санкт-Петербург) Кинетика кристаллизации GaAs нитевидных нанокристаллов с амфотерным катализатором
3. **Барнаш Я.В., Каманина Н.В.** (Санкт-Петербург) Преимущества процесса наноструктурирования материалов для расширения спектральной области функционирования, прозрачности и микротвердости
4. **Корягин С.А., Горбунов А.А., Кужаков П.В., Каманина Н.В.** (Санкт-Петербург) Пути создания ориентирующих покрытий на основе полиимида для управления ориентацией ЖК – молекул
5. **Русанов Б.А., Мухаметзянов Т.А., Сидоров В.Е.** (Екатеринбург, Казань) Кристаллизация аморфных сплавов Al-Ni-Co-(Nd, Gd, Tb)
6. **Сидоров В.Е., Сабирзянов А.А., Русанов Б.А., Петрова С.А., Ладьянов В.И., Ардашева Д.П.** (Екатеринбург, Ижевск) Особенности кристаллизации и магнитная восприимчивость аморфных сплавов Fe-Ni-Nb-B
7. **Кулишов А.А., Лясникова М.С., Юрасик Г.А., Афиногентова А.В., Постников В.А., Волошин А.Э.** (Москва) Рост из растворов органических скинтилляционных кристаллов

18 сентября

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: А.В. Агафонов

- | | |
|-------------------------|--|
| 09.00 – 09.30 | Б.А. Захаров (ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН, Новосибирск) ЦКП "СКИФ": возможности и статус реализации проекта |
| 09.30 – 10.00 | С.А. Козюхин (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва) Фемтосекундная лазерная кристаллизация фазопеременных материалов системы Ge-Sb-Te и перспективы применения в нанофотонике |
| 10.00 – 10.30 | Т.А. Мухаметзянов (Казанский федеральный университет, Казань) Сверхбыстрая калориметрия для исследования нуклеации и кристаллизации в переохлажденном расплаве |
| 10.30-10.45 Кофе | |

18 сентября

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ (10.45-12.45)

ЗАЛ 2 (Парус) Председатель: Н.Ж. Мамардашвили

18 сентября

МАСТЕР-КЛАСС (14.00-15.00)

Аудитория ИГХТУ

В.А. Блатов (Самарский государственный технический университет, Самара)
Программный комплекс для многоцелевого кристаллохимического анализа TOPOSPRO.

19 сентября

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: М.Г. Киселев

09.30 – 10.00 **В.М. Назарычев** (Филиал НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИВС, Санкт-Петербург) Влияние структурного упорядочения на эксплуатационные свойства полимеров и полимерных нанокомпозитов: результаты атомистического компьютерного моделирования

10.00 – 10.30 **Н.А. Сироткин** (Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново) Методы управления морфологией и составом наноструктур в условиях плазменно-жидкостного синтеза

10.30-10.45 Кофе

19 сентября

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ (10.45-12.30)

Секция 3 ЗАЛ 1 (Парус) Председатель: М.Г. Киселев

1. **Антина Л.А.,** Догадаева С.А., Шерудилло А.С., Калягин А.А., Березин М.Б., **Антина Е.В.** (Иваново) Дизайн BODIPY фотосенсибилизаторов и систем их доставки для флуоресцентной диагностики и фотодинамической терапии
2. **Северин А.В.,** Ярышев В.Ю., Орлова М.А. (Москва) Способы связывания медицинских радионуклидов рутения с гидроксипатитом для создания перспективного радиофармпрепарата
3. **Блохина С.В.,** Шарапова А.В., Заливалова М.А., Краснова Е.А. (Иваново) Улучшение растворимости противотуберкулезного пиразинамида с использованием глубоких эвтектических растворителей
4. **Khodov I.A.** (Ivanovo) Application of NMR methods in the study of conformers and crystal nucleation
5. **Kulikova O.M.,** Sheinin V.B. (Ivanovo) Hybrid nanoconjugates of cationic tetrapyrrole photosensitizers with anionic quantum dots for photodynamic theranostics
6. **Volkova T.V.,** Simonova O.R. (Ivanovo) Effect of pharmaceutical excipients on solubility, partition and permeability of olanzapine
7. **Воронин А.П.,** Рамазанова А.Г. (Иваново) Термическая анизотропия и псевдополиморфизм соли рилузола 2,4-дигидроксibenzoата

18 сентября

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ (10.45-12.45)

ЗАЛ 2 (Парус) Председатель: Н.Ж. Мамардашвили

1. Догадаева С.А., Антина Л.А., Березин М.Б., Антина Е.В. (Иваново) Водорастворимые системы доставки BODIPY фотосенсибилизаторов на основе металлорганического каркаса палладия
2. Каракеев И.В., Пуйтов В.В. (Тверь) Молекулярно-динамическое исследование термоиндуцированного структурного перехода металлических ГЦК нанокластеров в икосаэдрические изомеры
3. Крестьянинов М.А., Лапшина Е.Н. (Иваново) Структура и взаимодействия в системе DBN-МЕА
4. Дубасова Е.В., Косарева Е.К., Муравьев Н.В., Ананьев И.В. (Москва) Анализ электронной структуры в координатном пространстве для выявления межмолекулярных факторов, определяющих чувствительность высокоэнергетических соединений к удару
5. Куватов М.М., Логинов А.Б., Исмагилов Р.Р., Клещ В.И., Образцов А.Н. (Москва) Сравнительное исследование монокристаллических алмазных игл, получаемых осаждением из газовой фазы
6. Лесников А.С., Сорокина Н.И., Юрасик Г.А., Борщев О.В., Постников В.А. (Москва) Кристаллы триметилсилильного производного 9,10-дистирилантацена: рост, структура и спектрально-флуоресцентные свойства
7. Егоров Г.И., Круглякова А.А., Никитин М.Е. (Иваново) Изобарные термические расширяемости бинарной смеси глицерин + диметилсульфоксид
8. Голодухин Н.А., Севрюкова А.Н., Ким Е.Л., Александрова Д.Д., Андреев П.В. (Нижний Новгород, Санкт-Петербург) Кристаллизация пентаэритрита $C_5H_{12}O_4$
9. Abramov I.V., Kulikova O.M., Sheinin V.B. (Ivanovo) Effect of natural chiral additives on the enantiomeric balance of porphyrin nanotubes
10. Ордабаева А.Т., Мулдахметов З.М., Мейрамов М.Г., Ким С.В., Сулейменов С.И., Сулейменова Ш.С. (Караганда) Синтез композитного катализатора для гидрирования фенолов
11. Ордабаева А.Т., Мулдахметов З.М., Мейрамов М.Г., Ким С.В. (Караганда) Получение каменноугольного пека как сырья для электродного производства
12. Кузьмиков М.С., Шерудилло А.С., Гарибян А.А. (Иваново) Абсорбция CO_2 и физико-химические свойства растворителей с глубокой эвтектикой на основе аминовых гидрогалогенидов и алканолламинов
13. Федоров К.А., Гарибян А.А., Голубев В.А., Макаров Д.М. (Иваново) Гибридный подход к прогнозированию температур плавления в неионных эвтектических смесях
14. Баско А.В., Почивалов К.В., Юров М.Ю., Новиков И.В., Пакальнис В.В., Курындин И.С., Бронников С.В., Заболотнов А.С., Юшкин А.А., Волков А.В. (Иваново, Санкт-Петербург, Москва) Получение сепараторов их сверхвысокомолекулярного полиэтилена для Li-ионных аккумуляторов методом термически индуцированного фазового распада
15. Раменская Л.М., Кудрякова Н.О., Гришина Е.П. (Иваново) Получение и характеристика физико-химических свойств ионогеля BMRytrDCA - $SiO_2/PEG-15000$

16. **Раменская Л.М., Гришина Е.П., Кудрякова Н.О.** (Иваново) Особенности фазовых переходов кристаллизации и плавления N,N-диалкилимидазольных ионных жидкостей с дицианамид анионом по данным ДСК-анализа
17. **Касенова Ш.Б., Касенов Б.К., Сагинтаева Ж.И., Куанышбеков Е.Е., Турдиев М.Т., Темирбаева Э.М.** (Караганда) Синтез, теплостойкость и электрофизика лантан бариевого никелито-манганита
18. **Балдин Е.Д., Воробьева Г.А., Борунова А.Б., Шатов А.А., Харитонов Е.П., Столбов Д.Н., Шляхтина А.В.** (Москва) Получение полиморфных модификаций вольфрамата самария с использованием механической активации
19. **Почивалов К.В., Баско А.В., Лебедева Т.Н., Ильясова А.Н., Курындин И.С., Бронников С.В.** (Иваново, Санкт-Петербург) Исследование методом дифференциальной сканирующей калориметрии термического поведения смесей способного к кристаллизации полилактида с бензиловым спиртом
20. **Почивалов К.В., Баско А.В., Лебедева Т.Н., Ильясова А.Н.** (Иваново) Новый взгляд на термическое поведение смесей поливинилиденфторида с камфорой
21. **Лебедева Т.Н., Новиков И.В., Юров М.Ю., Баско А.В., Почивалов К.В.** (Иваново) Влияние молекулярной массы полиамида-12 на структуру и свойства получаемых методом термически индуцированного фазового распада порошков для 3D-печати
22. **Коровина А.В., Квашнин Д.Г.** (Москва) Нанопористый триазиновый каркас на основе молекулы F4-TCNQ: исследование стабильности и свойств
23. **Петрова С.С., Квашнин Д.Г.** (Москва) Моделирование и анализ стабильности гибридной структуры TE@УНТ
24. **Стельмах Н.М., Груздев М.С., Шмуклер Л.Э., Сафонова Л.П.** (Иваново) Влияние природы аниона на термическое поведение протонных ионных жидкостей на основе катиона этаноламмония
25. **Poletaeva U.V., Kulikova O.M., Sheinin V.B.** (Ivanovo) «ON/OFF/ON» fluorescent systems based on water-soluble anionic quantum dots, tetrapyrrole cationic photosensitizers and DNA
26. **Ивлев А.А., Колыбалов Д.С., Архипов С.Г., Кадцын Е.Д., Дян О.Т.** (Кольцово, Новосибирск) Получение и дифракционные исследования твердых форм противоопухолевого препарата тековиримата
27. **Ведькал А.В., Кадцын Е.Д.** (Кольцово, Новосибирск) Разработка программного обеспечения для интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния
28. **Бетина А.А., Богачев Н.А., Причислый К.С., Жданова К.Т., Мерещенко А.С.** (Санкт-Петербург) Сравнительный анализ свойств наночастиц $\text{NaGd}_{0.7}\text{Eu}_{0.3}\text{F}_4$, $\text{KGd}_{0.7}\text{Eu}_{0.3}\text{F}_4$ и $\text{Rb}(\text{Gd}_{0.7}\text{Eu}_{0.3})_3\text{F}_{10}$
29. **Блохина С.В., Шарапова А.В., Заливалова М.А., Краснова Е.А.** (Иваново) Новая терапевтическая эвтектическая система тиацетазон/полиэтиленгликоль с улучшенной водной растворимостью: дизайн и свойства
30. **Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А.** (Иваново) Сравнительный анализ пространственной структуры индометацина и бикалутамида в ДМСО методом NOESY
31. **Кочкина Н.Е., Бутикова О.А., Зарубин А.А., Терехова И.В.** (Иваново) Термочувствительные гидрогели на основе гидроксипропилметилцеллюлозы для таргетной доставки 5-фторурацила
32. **Кочкина Н.Е., Бутикова О.А., Делягина Е.С., Терехова И.В.** (Иваново) Морфология и структурная организация композитов на основе металл-органического каркаса ZIF-67 и финголимода

33. **Соборнова В.В., Белов К.В., Киселев М.Г., Ходов И.А. (Иваново)** Установление сорбционных и структурных характеристик аэрогеля SiO₂, допированного флуфенамовой кислотой, на основе данных спектроскопии ЯМР
34. **Prokhorova D.R., Smirnov V.I., Tyunina E.Yu. (Ivanovo)** Thermodynamic parameters of dissolution and solvation of β -alanyl-L-histidine in aqueous solutions of some amides
35. **Прохорова Д.Р., Тюнина Е.Ю., Тарасова Г.Н., Межевой И.Н. (Иваново)** Термодинамический подход для оценки космотропности аминокислот и витаминов в жидких средах как основы их функциональной активности
36. **Мололина А.А., Белов К.В., Крестьянинов М.А., Соборнова В.В., Ходов И.А. (Иваново)** Роль среды и невалентных взаимодействий в конформационных превращениях бикалутамида: сравнительный анализ методами ЯМР
37. **Simonova O.R., Volkova T.V. (Ivanovo)** Cyclodextrin effect on permeability and partition of nortriptyline hydrochloride
38. **Делягина Е.С., Никитина М.Г., Парфенов А.С., Пануев Д.М., Терехова И.В. (Иваново)** Получение и свойства металл-органических каркасов на основе глутаминовой кислоты, предназначенных для доставки финголимода
39. **Пануев Д.М., Агафонов М.А., Терехова И.В. (Иваново)** Гидрогели на основе плуроников различного строения с содержанием тофацитиниба
40. **Кузьмиков М.С., Дышин А.А., Опарин Р.Д., Воронин А.П., Крестьянинов М.А., Киселев М.Г. (Иваново)** Особенности полиморфизма флуфенамовой кислоты в процессе «захвата» молекулы диоксида углерода.
41. **Сарапулов А.С., Королев В.В., Сироткин Н.А., Балмасова О.В. (Иваново)** Модификация поверхности оксида графена магнитным полем в процессе синтеза методом подводного плазменного разряда.
42. **Одинцова Е.Г., Гурина Д.Л., Будков Ю.А. (Иваново)** Молекулярно-динамическое исследование поведения электролитов в плоских нанопорах кристобалита: роль поверхностных эффектов и конфайнмента.
43. **Терехина Е.Н., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е. (Иваново)** Влияние температуры на структуру и поведение комплекса включения β -циклодекстрина с хелидоновой кислотой: молекулярно-динамическое моделирование.
44. **Аладьева А.В., Юрасик Г.А., Сорокин Т.А., Постников В.А., Борщев О.В. (Москва)** Полиморфизм кристаллов триметилсилильного производного 4,7-дифенил-2,1,3-бензотиадазола

Программа II Всероссийской молодежной школы по химической термодинамике

15 СЕНТЯБРЯ, ПОНЕДЕЛЬНИК	
12.00 - 14.00	Регистрация участников
14.00 - 14.15	Открытие конференции и школы
14.15 - 16.15	Совместная пленарная сессия (актовый зал ИГХТУ)
16.15 - 16.30	Перерыв на кофе
Лекционное заседание молодежной школы	
(Ивановский государственный химико-технологический университет)	
16.30 - 17.30	<u>Соломонов Б.Н.</u> , Ягофаров М.И. НОВОЕ ПРОЧТЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ГИББСА ($\Delta G = \Delta H - T\Delta S$) В ТЕРМОДИНАМИКЕ СОЛЬВАТАЦИИ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НЕЭЛЕКТРОЛИТОВ <i>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия</i>
18.00	Вечер встречи
16 СЕНТЯБРЯ, ВТОРНИК	
Лекционное заседание молодежной школы	
(Манчестер, конференц-зал)	
9.00 – 9.30	<u>Плешков Д.Н.</u> ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КАК ИНСТРУМЕНТ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ <i>ООО «Техноинфо», Москва, Россия</i>
9.30 – 10.30	<u>Зуев Ю.Ф.</u> , Ситницкий А.Э. ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСЛЯЦИОННОЙ ДИФфуЗИИ КАК СПОСОБ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ БЕЛКОВ <i>Казанский институт биохимии и биофизики ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия</i>
10.30 – 10.45	Перерыв на кофе
10.45 – 11.45	<u>Зуева О.С.</u> , Зуев Ю.Ф. ПАРАДОКС НЕРАВНОВЕСНОСТИ РАСТВОРОВ ИОННЫХ ПАВ: МАКРО- И МИКРО-ПОДХОД <i>Казанский государственный энергетический университет, Казань, Россия</i>
11.45 – 14.00	Перерыв на обед
14.00 – 15.00	<u>Викторов А.И.</u> МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЗОМАСШТАБНЫХ СТРУКТУР В РАСТВОРАХ ЦЕПОЧЕЧНЫХ АМФИФИЛОВ: МОЛЕКУЛЯРНО- ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД <i>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт- Петербург, Россия</i>
Секционные доклады молодых ученых	
(Манчестер, конференц-зал)	

<i>Председатели заседания: к.х.н Манин А.Н., д.ф-м.н. Ходов И.А.</i>	
15.00 – 15.12	<u>Мазур Д.А.</u> , Брандышев П.Е., Доронин С.В., Будков Ю.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СЛОЯ НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛ- ЭЛЕКТРОЛИТ В РАМКАХ ТЕОРИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ <i>Лаборатория вычислительной физики, НИУ ВШЭ, Москва, Россия</i>
15.12 – 15.24	<u>Яруллин Д.Н.</u> , Гамов Г.А. ИНКРЕМЕНТАЛЬНЫЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ КОНСТАНТ РАВНОВЕСИЯ РЕАКЦИИ ГИДРОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ С СЫВОРОТОЧНЫМИ АЛЬБУМИНАМИ <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i>
15.24 – 15.36	<u>Хабибуллина Д.С.</u> , Нагриманов Р.Н., Сиразиева А.Р. ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ <i>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия</i>
15.36 – 15.48	<u>Хисамиев М.Б.</u> , Ягофаров М.И., Соколов А.А., Соломонов Б.Н. СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ ЭНЕРГИЯМИ ГИББСА И ЭНТАЛЬПИЯМИ СОЛЬВАТАЦИИ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ <i>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия</i>
15.48 – 16.00	<u>Логачева О.И.</u> , Яруллин Д.Н., Рощин И.С. Название доклада: ТЕРМОДИНАМИКА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ УРАНИЛА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ: ВЛИЯНИЕ ЧИСЛА И ПОЛОЖЕНИЯ ГИДРОКСОГРУПП В ЛИГАНДЕ <i>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия</i>
17.00 – 17.45	Мастер-классы по группам (ИХР РАН)
17 СЕНТЯБРЯ, СРЕДА	
Флэш-доклады молодых ученых	
(Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, конференц-зал)	
<i>Председатель заседания: к.х.н. Белов К.В.</i>	
9.00 – 9.05	<u>Мололина А.А.</u> , Соборнова В.В., Белов К.В., Крестьянинов М.А., Ходов И.А (стенд 1) РОЛЬ СРЕДЫ И НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОНФОРМАЦИОННЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ БИКАЛУТАМИДА: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЯМР <i>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия</i>
9.05 – 9.10	<u>Гибадуллина А.Ф.</u> , Хотинев В.А., Карабаналов М.С., Половов И.Б. (стенд 2) СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ NI-CR-MO

	<i>Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия</i>
9.10 – 9.15	<u>Ковалев А.Е.</u> , Белов К.В., Ходов И.А. (стенд 3) КОНФОРМАЦИОННАЯ ЛАБИЛЬНОСТЬ ИНДОМЕТАЦИНА В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ^1H - ^1H NOESY <i>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия</i>
9.15 – 9.20	<u>Карасева Я.Е.</u> , Алимпиева М.Е., Малова А.В., Пырзу Д.Ф. (стенд 4) ТЕРМОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СМЕШАННОЛИГАНДНОГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ МЕДИ (II) С ГЛИЦИЛГЛИЦИНОМ И АМИНОКИСЛОТАМИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ <i>Ивановский государственный университет, Иваново, Россия</i>
9.20 – 9.25	<u>Бойцов Д.Е.</u> , Крылова Ю.А. (стенд 5) ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СУБЛИМАЦИИ КАК МЕТОДА ПОЛУЧЕНИЯ СОКРИСТАЛЛОВ <i>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия</i>
9.25 – 9.30	<u>Гималетдинова А.Э.</u> , Гараева Н.С., Рябов С.А., Усачев К.С. (стенд 6) УСТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ БЕЛКА ЕТТА ИЗ ЗОЛОТИСТОГО СТАФИЛОКОККА МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ <i>Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия</i>
Лекционное заседание молодежной школы	
(Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, конференц-зал)	
9.30 – 10.30	<u>Толстой П.М.</u> ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В СПЕКТРАХ ЯМР: ИЗУЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ И КИНЕТИКИ РЕАКЦИЙ <i>Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия</i>
10.30 – 10.45	Перерыв на кофе
Семинары ведущих ученых	
(Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, конференц-зал)	
10.45 – 12.15	Макаров Д.М., Ксенофонтов А.А. ML ИНСТРУМЕНТЫ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ <i>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН</i>
12.15 – 13.15	Перерыв на обед
13.15 – 14.45	Брандышев П.Е.¹, Мазур Д.А.¹, Гурина Д.Л.² МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СЛОЯ НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛ/РАСТВОР ЭЛЕКТРОЛИТА: ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ДО ПРИЛОЖЕНИЙ. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ ¹ НИИУ «Высшая школа экономики» ² Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
14.45 – 15.00	Перерыв на кофе
15.00 – 16.30	Викторов А.И., Сорина П.О. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО ПО ДЛЯ РАСЧЕТА МИЦЕЛЛ, КАПЕЛЬ, И ДР.

	<i>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия</i>
9.00 – 16.30	Стендовая сессия молодых ученых (ИХР РАН)
18 СЕНТЯБРЯ, ЧЕТВЕРГ	
Лекционное заседание молодежной школы	
Пленарная сессия конференции (Парус Зал 1)	
9.00 – 9.30	<u>Захаров Б.А.</u> ЦКП «СКИФ»: ВОЗМОЖНОСТИ И СТАТУС РЕАЛИЗАЦИИ ПРОЕКТА <i>ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Новосибирск</i>
(Манчестер, конференц-зал)	
09.30 – 10.30	<u>Горбачук В.В.</u> ПОЛИМОРФИЗМ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ: ПРОБЛЕМЫ И РЕШЕНИЯ <i>Казанский федеральный университет, Казань</i>
10.45 – 11.45	<u>Усачев К.С.</u> СТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СВЯЗЫВАНИЯ ФАКТОРОВ РЕГУЛЯЦИИ ТРАНСЛЯЦИИ С РИБОСОМОЙ <i>ФИЦ «Казанский научный центр Российской академии наук», Казань, Россия</i>
11.45 – 14.00	Перерыв на обед
14.00 – 15.00	<u>Полоцкий А.А.</u> , Иванова А.С. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ АДсорбции СТАТИСТИЧЕСКИХ И РЕГУЛЯРНЫХ СОПОЛИМЕРОВ <i>Филиал ФГБУН «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» – Институт высокомолекулярных соединений», Санкт-Петербург, Россия</i>
Секционные доклады молодых ученых	
(Манчестер, конференц-зал)	
<i>Председатели заседания: д.х.н Ягофаров М.И., д.ф-м.н. Ходов И.А.</i>	
15.00 – 15.12	<u>Васильева В.А.</u> , Мазур Д.А., Брандышев П.Е., Будков Ю.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТВОРА ЭЛЕКТРОЛИТА С ПРИМЕСЬЮ ЦВИТТЕРИОННЫХ ОСМОЛИТОВ, ЗАКЛЮЧЕННЫХ В ЩЕЛЕВИДНУЮ ПРОВОДЯЩУЮ НАНОПОРУ, В СОСТОЯНИИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В РАМКАХ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ТЕОРИИ ПУАССОНА-БОЛЬЦМАНА <i>Лаборатория вычислительной физики, НИУ ВШЭ, Москва, Россия</i>
15.12 – 15.24	<u>Луканов М.М.</u> , Байдышев В.С., Квашнин А.Г. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ML-ПОТЕНЦИАЛА <i>Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия</i>
15.24 – 15.36	<u>Сибгатуллина Р.Л.</u> , Нагриманов Р.Н.

	НОВОЕ СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ЭНТАЛЬПИЕЙ РАСТВОРЕНИЯ n-АЛКАНОВ И ВКЛАДОМ МЕТИЛЕНОВОГО ФРАГМЕНТА В ЭНТАЛЬПИЮ ИСПАРЕНИЯ <i>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия</i>
15.36 – 15.48	<u>Радина А.Д.</u> , Квашнин А.Г. СОПОСТАВЛЕНИЕ АДсорбЦИОННЫХ И КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТЕЙ ВЫСШИХ БОРИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ <i>Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия</i>
15.48 – 16.00	<u>Бетнев Г.И.</u> , Гуськов А.В., Гуськов В.Н., Гагарин П.Г., Гавричев К.С. ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ЦИРКОНАТА ИТТРИЯ <i>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия</i>
17.00 – 17.45	Мастер-классы по группам (ИХР РАН)
19 СЕНТЯБРЯ, ПЯТНИЦА	
Лекционное заседание молодежной школы	
(Парус, Зал 2)	
9.30 – 10.30	<u>Будков Ю.А.</u> МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СЛОЯ НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛ/РАСТВОР ЭЛЕКТРОЛИТА: ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ДО ПРИЛОЖЕНИЙ <i>НИУ «Высшая школа экономики», Москва, Россия</i> <i>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия</i>
10.30 – 10.45	Перерыв на кофе
10.45 – 11.45	<u>Квашнин А.Г.</u> МЕТОДЫ ЦИФРОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ <i>Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия</i>
11.45 – 12.30	Перерыв на обед
12.30	Закрытие конференции и подведение итогов школы
Лекционное заседание молодежной школы	
(Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН)	
14.00 – 15.00	<u>Худоба Д.М.</u> РЕАКТОР ИБР-2 И ПРИМЕНЕНИЕ НЕУПРУГОГО РАССЕЙЯНИЯ НЕЙТРОНОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ <i>Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка, ОИЯИ, Дубна, Россия</i>
15.00 – 16.00	<u>Гуда А.А.</u> IN SITU ДИАГНОСТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В МИКРОФЛЮИДНЫХ СИСТЕМАХ <i>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия</i>
16.00 – 16.45	Мастер-классы по группам (ИХР РАН)