



5 апреля 2024 (пятница)
МФТИ, Цифра 4.18–5.17

Председатель секции: **В. В. Стегайлов**,
д.ф.-м.н., профессор МФТИ, зав. отд. ОИВТ РАН
Рецензент секции: **А. С. Антропов**,
к.ф.-м.н., м.н.с. МФТИ, инж.-иссл. ОИВТ РАН
Секретарь секции: **И. В. Воронов**,
студент МФТИ, ст.-иссл. ОИВТ РАН

Программа конференции

Стегайлов Владимир Владимирович		11:00–11:15	
Приветственное слово председателя секции			
1	Буйлова Марианна Александровна	Б3	11:15–11:23
Одномерные наноленты Ta ₂ Pd ₃ Se ₈ : новые фазы и их свойства МФТИ			
2	Леонова Микаэла Сергеевна	Б4	11:27–11:35
Определение типа механизма реакции фосфорилирования в активном центре протеинкиназы методами молекулярного моделирования МГУ			
3	Федяева Мария Александровна	М1	11:39–11:49
Взаимные превращения хромофорных видов полисульфидов в минералах группы содалита: исследование декомпозиции молекул S ₆ с помощью DFT Сколтех			
4	Проломов Илья Викторович	М1	11:54–12:04
Квантово-химическое моделирование механизма реакции Дильса-Альдера с иминенаминами РХТУ			
5	Гребенюк Максим Александрович	М1	12:09–12:19
Высокотемпературная сверхпроводимость в Ca-Y-N системе при высоком давлении Сколтех			
6	Лобашев Егор Андреевич	М2	12:24–12:34
На пути к расчету диффузии в нитриде урана из первых принципов: энергии образования и миграции точечных дефектов МФТИ			
7	Чичеватов Глеб Дмитриевич	М2	12:39–12:49
Исследование точечных дефектов в Fe ₃ O ₄ и FeCr ₂ O ₄ с помощью метода DFT+U МФТИ			
8	Чекушкин Пётр Михайлович	А	12:54–13:04
Исследование интеркаляции ионов лития через межфазную границу LiMn ₂ O ₄ / LiF методом теории функционала электронной плотности МФТИ			

Обеденный перерыв

до 14:00

Приглашенный доклад

Фиданян Карен Саркисович	14:00–14:30
Учёт квантовых свойств ядер в атомистическом моделировании ВНИИА им. Н. Л. Духова, PhD (Humboldt University)	

9	Мкртчян Яков Романович	Б2	14:40–14:48
Предсказание вязкости углеводородов с помощью молекулярной динамики и машинного обучения ВШЭ			
10	Машуров Сергей Денисович	Б3	14:52–15:00
Изучение FSL-конструктов с γ -Циклодекстрином методом молекулярной динамики МИФИ			
11	Яшин Прохор Алексеевич	Б4	15:04–15:12
Разработка дескрипторов для определения методами машинного обучения локальной структуры атомистических моделей аморфных льдов МФТИ			
12	Баганцова Екатерина Романовна	Б4	15:16–15:24
Анализ эффективности различных типов нейронных сетей для распознавания структуры воды в жидком и твердом состоянии МФТИ			
13	Свинкин Никита Алексеевич	М1	15:28–15:38
Исследование адсорбции аммиака на поверхностях кремния (100), (110), (111) СПбАУ			
14	Воронов Илья Витальевич	М2	15:43–15:53
Влияние структурной неоднородности на тепловые колебания частиц в плазменно-пылевом монослое МФТИ			
15	Половинкин Михаил Сергеевич	М2	15:58–16:08
Вычисление краевого угла сидячей капли на лиофильных и лиофобных плоских поверхностях методом молекулярной динамики СПбГУ			
16	Хнкоян Георгий Врежович	М2	16:13–16:23
Образование Pb-O в возмущенном потоке жидкого свинца: молекулярно динамический подход МФТИ			
17	Никифоров Георгий Андреевич	А	16:28–16:38
Комплексное влияние пористости и среднего линейного размера пор на упругопластические свойства пористого материала КФУ			
18	Ленёв Дмитрий Юрьевич	Н.С.	16:43–16:53
Поверхностное натяжение и адсорбция на границе пар-жидкость в системе метан-этан ОИВТ РАН			

Подведение итогов и награждение

16:58–17:15