

61-я Всероссийская научная конференция МФТИ

Программа Секции молекулярного моделирования

22 ноября 2018, 10:00, Синий читальный зал ГК, МФТИ

10:00 – 10:05 (5 минут)

Открытие секции

10:05 – 10:45 (40 минут)

Современная вычислительная химия как источник достоверных термодинамических и кинетических данных (приглашенный доклад)

Юрий Миненков

10:45 – 11:00 (15 минут)

Моделирование процесса взаимодействия пучков с поверхностью твердых тел в ANAB-технологии

Вадим Сироткин

11:00 – 11:15 (15 минут)

Молекулярно-динамическое моделирование новых структур льда

Алвард Барсегиан

11:15 – 11:30 (15 минут)

Влияние поверхностной самодиффузии на подвижность пузырей в ОЦК уране

Александр Антропов

11:30 – 11:45 (15 минут)

Сравнение различных методов расчета температуры фазового перехода посредством метода молекулярной динамики на примере циркония

Илья Гордеев

11:45 – 12:00 (15 минут)

Атомистическое моделирование миграции границ зерен в поликристаллических металлах

Мария Корнева

12:00 – 12:15 (15 минут)

Исследование многокомпонентных сплавов при помощи машинно-обучаемых межатомных потенциалов

Татьяна Костюченко

12:15 – 12:30 (15 минут)

Коллективные эффекты в переохлажденных расплавах бинарных соединений

Дмитрий Флейта

12:30 – 12:45 (15 минут)

Молекулярно-динамический анализ топологии переплетения линейных полимеров в контакте с углеродными наночастицами

Михаил Логунов

12:45 – 13:00 (15 минут)

Атомистическое моделирование кривой испарения газоконденсатной смеси

Булат Валеев

13:00 – 13:15 (15 минут)

Континуальная модель фильтрации флюида в пористой среде

Степан Захаров

13:15 – 13:30 (15 минут)

Молекулярно-динамическое моделирование ретроградной конденсации в смеси метан-этан

Дмитрий Ленёв

13:30 – 14:30 (60 минут)

Обеденный перерыв

14:30 – 15:10 (40 минут)

Simulation theory: взаимосвязь квантово-химических расчётов и реальности
(приглашенный доклад)

Денис Тихонов

15:10 – 15:25 (15 минут)

Предсказание свойств жидких углеводородов для задач индустрии

Николай Кондратюк

15:25 – 15:40 (15 минут)

Влияние радиуса катиона на процессы сольватации и взаимодействие катиона с супероксид анионом O^{2-} в зависимости от типа растворителя

Владимир Смирнов

15:40 – 15:55 (15 минут)

Расчет электрокаталитических свойств графена при наличии точечных дефектов

Виталий Кисленко

16:10 – 16:25 (15 минут)

Исследование механизма каталитического действия линейного топологического дефекта в графене

Сергей Павлов

16:25 – 16:40 (15 минут)

Фазовые переходы системы с потенциалом Юкавы в электростатической ловушке

Владислав Николаев

16:40 – 16:55 (15 минут)

Метастабильный молекулярный водород при высоких давлениях

Роман Сартан

16:55 – 17:10 (15 минут)

Влияние размера моделируемой системы на точность расчета коэффициента диффузии в жидкости

Максим Орехов

17:10 – 17:25 (15 минут)

Метод WPMD-DFT для моделирования неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества

Ярослав Лавриненко

17:25 – 17:40 (15 минут)

Поиск молекулярных сокристаллов энергетических материалов с помощью USPEX

Мария Пахнова

17:40 – 17:55 (15 минут)

Подведение итогов

17:55 – 18:10 (15 минут)

Объявление рейтинга докладов

Заккрытие секции
