



6 апреля 2023 (четверг)  
Синий читальный зал ГК МФТИ  
Онлайн:  
<https://meet.google.com/kkw-mfwd-rxt>

Председатель секции: **В. В. Стегайлов**,  
д.ф.-м.н., профессор МФТИ, зав. отд. ОИВТ РАН  
Рецензент секции: **В. В. Писарев**,  
к.ф.-м.н., доцент МФТИ, зав. лаб. ОИВТ РАН  
Секретарь секции: **А. С. Антропов**,  
аспирант МФТИ, м.н.с. ОИВТ РАН

## Программа

Н.С. – научный сотрудник, Асп. - аспирантура, М(1-2) - магистратура, Б(1-4) - бакалавриат

### Подсекция: Расчеты из первых принципов

1.	<b>Алексей Пелевкин</b>	<b>Н.С.</b>	<b>11:00</b>	
Поуровневые константы скорости процессов в системе $O(3P)+H_2(v)$ : метод квазиклассических траекторий и феноменологические модели ФАУ "Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова"				
2.	<b>Илья Проломов</b>	<b>Б4</b>	<b>11:15</b>	
Влияние обратного $\alpha$ -эффекта на стабильность органических пероксидкатионов РХТУ им. Д. И. Менделеева				
3.	<b>Радион Зарипов</b>	<b>Б4</b>	<b>11:27</b>	
Расчет термодинамических характеристик тетраазота $N_4$ НИЯУ МИФИ				
4.	<b>Максим Гребенюк</b>	<b>Б4</b>	<b>11:39</b>	
Тройные сверхпроводящие гидриды в системе Ca-Y-H РХТУ им. Д. И. Менделеева				
5.	<b>Константин Кравцов</b>	<b>Б4</b>	<b>11:51</b>	
Рамановский спектр $As_2S_3$ из первых принципов МФТИ				
6.	<b>Вадим Дроздов</b>	<b>(дистанционно)</b>	<b>Б4</b>	<b>12:03</b>
Численные исследования эффективной массы полупроводниковых материалов на основе первопринципных расчетов в программе Quantum Espresso УрФУ им. первого Президента России Б. Н. Ельцина				
7.	<b>Артём Глушак</b>	<b>М1</b>	<b>12:15</b>	
Исследование фазового перехода в соли Фриделя методами атомистического моделирования НИУ ВШЭ (ГУ-ВШЭ)				
8.	<b>Виталий Кисленко</b>	<b>Асп.</b>	<b>12:30</b>	
Расчет термодинамики реакции восстановления кислорода на N-допированных графенах Сколтех				



<b>9.</b>	<b>Леонид Кущук</b>	<b>Б3</b>	<b>12:45</b>	
Свойства и структура монослоя нитрида ванадия (VN) в ферромагнитном состоянии Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана				
<b>10.</b>	<b>Глеб Чичеватов</b>	<b>М1</b>	<b>12:57</b>	
Магнетизм в двумерных металлоценоподобных структурах МФТИ				
<b>11.</b>	<b>Елизавета Калика</b>	<b>(дистанционно)</b>	<b>Б4</b>	<b>13:12</b>
Многомасштабное моделирование монослоя NiCl <sub>2</sub> МФТИ				

<b>###</b>	<b>Обеденный Перерыв</b>		<b>13:25</b>
Общение, дискуссии, обсуждение докладов.			

**Подсекция: Классическая молекулярная динамика (МД)**

<b>12.</b>	<b>Владимир Недёркин</b>	<b>(дистанционно)</b>	<b>Б4</b>	<b>14:10</b>
Теоретическое исследование поверхностных сил в леннард-джонсовской жидкости с наноразмерными твердыми частицами ДонНУ				
<b>13.</b>	<b>Дмитрий Корогод</b>		<b>Б4</b>	<b>14:22</b>
Молекулярно-динамическое моделирование дислокаций в моонитриде урана МФТИ				
<b>14.</b>	<b>Егор Лобашев</b>		<b>М1</b>	<b>14:34</b>
Формирование газонаполненных нанопузырьков пузырьков в гамма-уране при избытке междоузельных атомов: связь молекулярной динамики и кинетики МФТИ				
<b>15.</b>	<b>Анастасия Зеленина</b>		<b>М2</b>	<b>14:49</b>
Атомистическое моделирование наночастиц Si-Al методом молекулярной динамики МФТИ				
<b>16.</b>	<b>Полина Безбородова</b>	<b>(дистанционно)</b>	<b>Асп.</b>	<b>15:04</b>
Влияние атомов водорода на сопротивление сдвигу Al-Cu сплава: молекулярная динамика и континуальное моделирование Челябинский государственный университет				
<b>17.</b>	<b>Георгий Никифоров</b>		<b>Асп.</b>	<b>15:19</b>
Зависимость механических свойств пористого никелида титана от способа пространственного распределения пор Казанский Федеральный Университет				

**65**ВСЕРОССИЙСКАЯ  
НАУЧНАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ  
МФТИ**Секция молекулярного  
моделирования**

<b>18.</b>	<b>Вероника Димитрева</b>	<b>(дистанционно)</b>	<b>М1</b>	<b>15:34</b>
Изучение взаимодействия циклодекстрин-содержащих наночастиц с противоопухолевыми препаратами методом молекулярной динамики <b>НИЯУ МИФИ</b>				
<b>19.</b>	<b>Илья Воронов</b>		<b>М1</b>	<b>15:49</b>
Влияние пространственной локализации колебаний частиц на свойства системы экранированных зарядов в электростатической ловушке <b>МФТИ</b>				

**Подсекция: МД с машинно-обученными потенциалами**

<b>20.</b>	<b>Марианна Буйлова</b>		<b>Б3</b>	<b>16:04</b>
Применение методов машинного обучения для исследования фазовых переходов углеродных материалов <b>МФТИ</b>				
<b>21.</b>	<b>Камиль Гарифуллин</b>		<b>Б4</b>	<b>16:16</b>
Исследование химического осаждения из газовой фазы с применением машинно-обучаемых потенциалов <b>МФТИ</b>				
<b>22.</b>	<b>Алексей Котыхов</b>		<b>М1</b>	<b>16:28</b>
Применение магнитного машинно-обучаемого межатомного потенциала для исследования сплава Fe-Al <b>МФТИ</b>				
<b>23.</b>	<b>Георгий Хнкоян</b>		<b>М1</b>	<b>16:43</b>
Межатомный потенциал для описания расплава свинца с примесью кислорода <b>МФТИ</b>				

**Подсекция: Методы машинного обучения**

<b>24.</b>	<b>Ольга Климанова</b>		<b>Б4</b>	<b>16:58</b>
Метод расчёта температуры плавления однокомпонентных материалов на основе молекулярной динамики и байесовской регрессии <b>МФТИ</b>				
<b>25.</b>	<b>Виктория Зинькович</b>		<b>Б4</b>	<b>17:10</b>
Предсказание новых сплавов на основе первопринципных расчетов и машинного обучения <b>МФТИ</b>				
<b>26.</b>	<b>Людмила Березникова</b>		<b>М1</b>	<b>17:22</b>
Применение методов машинного обучения для расчёта свойств оптических материалов <b>МФТИ</b>				