

3 апреля 2024 11:00 ПО КПМ МФТИ

► Как добраться:

► Копаницук И. В. (30 мин.) – На пути к цифровой нефти: предсказание поверхностного натяжения при пластовых условиях (пленарный доклад)
► Дещеня В. И. (8 мин.) – Изучение характеристик смесей органических жидкостей методами молекулярной динамики
► Смирнов О. М. (10 мин.) – Адсорбция и поверхностное натяжение на границе жидкостей в системе вода-толуол-н-додекан
► Семенчук А. А. (5 мин.) – Новый алгоритм для расчета контактного угла бинарных смесей в нанопорах
► Алексеева М. С. (8 мин.) – Упругие свойства, пиролиз и диффузия газа в керогенах по данным атомистического моделирования
► Никитюк Б. И. (8 мин.) – Нарушение соотношения Стокса-Эйнштейна при высоких давлениях
► Бакулин И. К. (10 мин.) – Анализ сети водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана методом молекулярной динамики
► Негодин В. Д. (10 мин.) – Влияние протонного переноса на диффузию ионов H3O+ и OH- в воде
► Кашурин О. В. (5 мин.) – Верификация межатоных потенциалов по вязкости и растворимости для моделирования жидких мембран
► Вандышев Г. К. (5 мин.) – Моделирование двойного электрического слоя в концентрированных растворах электролитов методами молекулярной динамики.
► Блинова А. Р. (10 мин.) – Моделирование взаимодействия флавиномононуклеотида (ФМН) с кислородом в белке miniSOG
► Заваразина Я. И. (8 мин.) – Нейротоксин ВеКм-1 блокирует каналы hERG при помощи незаменимого остатка аргинина: анализ in silico модели комплекса
► Маллаев Р. А. (5 мин.) – ARTEMIS: изучение аллостерической коммуникации биомолекул
► Игольников Е. И. (5 мин.) – Моделирование хлорофилла а в воде
► Цианавский Р. Е. (5 мин.) – Молекулярно-динамическая модель связывающего лёд белка
► Касапенко Н. А. (8 мин.) – Фазовый переход в жидком кристалле 5CB
► Флейта Д. Ю. (10 мин.) – Особенности поведения и температуры стеклования бинарных расплавов на основе никеля
► Трофимов И. С. (5 мин.) – Улучшение прогнозирующей способности моделей машинного обучения через расширение признакового пространства с использованием расчетов ThermoCalc
► Хузин Р. И. (5 мин.) – Автоматический поиск корреляций физических величин на основе синтетических данных

4 апреля 2024 11:00 4.18-5.17 Физтех Цифра

► Как добраться:

► Олейниченко А. В. (30 мин.) – Релятивистский метод связанных кластеров для моделирования электронных состояний и свойств систем с открытыми оболочками (пленарный доклад)
► Руманцев А. С. (8 мин.) – Алгоритм CROP для ускорения сходимости итерационной процедуры решения уравнений релятивистского метода связанных кластеров
► Хадеева П. А. (8 мин.) – Квантово-химическое моделирование электронной структуры галогенидов иттербия при помощи методов связанных кластеров
► Кожеников И. Г. (5 мин.) – Исследование структуры и свойств молекулы ThF+ релятивистским методом связанных кластеров
► Хинкочян В. В. (8 мин.) – Определение равновесных концентраций H и H2 в расплаве Pb при помощи первопринципных метадинамических расчетов
► Воронов И. В. (8 мин.) – Атомистическое моделирование коррозии бикристалла железа при контакте с жидким свинцом
► Лобашев Е. А. (8 мин.) – Свободная энергия образования точечных дефектов при конечных температурах
► Чичеватов Г. Д. (8 мин.) – Исследование точечных дефектов в Fe3O4 и FeCr2O4 с помощью метода DFT+U
► Фоминых Н. А. (8 мин.) – Поляронный транспорт в феррите никеля NiFe2O4
► Дусман П. А. (5 мин.) – Описание процесса растворения хромистой шпинели в контакте с жидким расплавом свинца-висмута с помощью локально равновесного термодинамического подхода
► Пилюгин Л. С. (5 мин.) – Моделирование краевых дислокаций методом молекулярной динамики: сравнение гцк алюминия и монокристада урана
► Павлов Д. Г. (8 мин.) – Проблемы ускорения молекулярно-динамических вычислений на гибридных суперкомпьютерах
► Пропад Я. В. (10 мин.) – Поиск стабильных сверхпроводящих гидридов с помощью генератора случайных структур с фиксированным окружением
► Аверин И. В. (8 мин.) – Локальный критерий плавления для малых систем
► Кравцов К. В. (8 мин.) – Рамановский спектр CeS2 из первых принципов
► Горемыкин И. А. (8 мин.) – Тожества Уорда для магнитных фаз допированной двумерной модели Хаббарда: аналитические результаты и численные расчёты методом DMFT
► Колотинский Д. А. (10 мин.) – Отклонение от обобщенной теоремы о равномерном распределении средней кинетической энергии как естественная мера невязанности в активной материи.
► Тюбаев Д. Д. (5 мин.) – Анализ динамики пылевых частиц в криогенном плазменно-пылевом эксперименте
► Добровенский Р. В. (5 мин.) – Пространственно-временные характеристики микроплазмы
► Федоров И. Д. (10 мин.) – Моделирование диссоциации экситонов в рамках первопринципных расчетов электронной структуры материалов: существующие подходы и примеры задач
► Плудадис Г. А. (5 мин.) – Динамические свойства флюида водорода при высоких давлениях
► Лукинчук В. Г. (8 мин.) – Метастабильные состояния молекулярного и атомарного флюида водорода при высоких давлениях