



04 апреля 2025, пятница  
МФТИ, КСП, 2 эт., конференц-зал

Председатель секции: В. В. Стегайлов,  
д.ф.-м.-н., проф. МФТИ, зав. отделом ОИВТ РАН  
Секретарь секции: И. В. Воронов,  
асп. МФТИ, м.н.с. ОИВТ РАН

### Программа конференции

Стегайлов Владимир Владимирович		10:00–10:05
Приветственное слово председателя секции		
1	Олейниченко Александр Витальевич	10:05–10:30
Эффективность тензорного разложения Таккера для представления кластерных амплитуд в релятивистском методе связанных кластеров (приглашенный доклад) НИЦ «Курчатовский Институт» — ПИЯФ		
2	Кашпурович Юрий Владимирович	10:30–10:40
Разработка стратегий параллелизации алгоритма метода Хартри-Фока в приближении разложения единицы МФТИ, 4 курс		
3	Лосев Михаил Игоревич	10:40–10:52
Прецизионный расчет энергетических уровней атома Si с использованием метода связанных кластеров с многодетерминантным вакуумом (ic-MRCC) МФТИ, 5 курс		
4	Шилов Михаил Сергеевич	10:52–11:04
Влияние металлической подложки на перенос заряда при адсорбции молекул газа на графен МФТИ, 5 курс		
5	Буйлова Марианна Александровна	11:04–11:14
Особенности структурных фазовых переходов в наноструктурах $Ta_2Pd_3Se_8$ и $Ta_2Ni_3Se_8$ МФТИ, 4 курс		
6	Климчук Дарья Олеговна	11:14–11:24
Резистивное переключение в наноструктуре биграфен/диаман, полученной на подложке $La_3Ga_5SiO_{14}$ путем облучения пучком электронов МИСИС, 4 курс		
7	Сторожева Ксения Дмитриевна	11:24–11:36
Исследование жесткости спиралеобразных олигомеров МГУ, 6 курс		
8	Степанюк Роман Алексеевич	11:36–11:51
Применение методов машинного обучения для предсказания спектров возбуждения флуоресценции на основе данных КМ/ММ МД флуоресцентных белков МГУ, аспирант		

9	Проломов Илья Викторович	11:51–12:06
FeCl <sub>2</sub> -опосредованная перегруппировка аминпероксидов в функционализированные тетрагидрофураны: Динамическая неинноцентность O-лигандов на Fe-центре координирует радикальный каскад превращений РХТУ, аспирант		
10	Руцкой Богдан Викторович	12:06–12:21
Значение локализации связевых функций для описания межмолекулярных взаимодействий на примере димеров CH <sub>4</sub> -Ne, CF <sub>4</sub> -Ne НИЦ «Курчатовский Институт»		
11	Нуйкин Семён Александрович	12:21–12:31
Исследование строения и каталитических свойств трёх активных центров F1-АТФазы МГУ, 3 курс		
12	Илюхина Екатерина Михайловна	12:31–12:41
Молекулярное моделирование ковалентного ингибирования мутантов K-Ras(G12D) и K-Ras(G12C) электрофильным кольцом оксирана МГУ, 3 курс		
13	Коган Сергей Александрович	12:41–12:51
Моделирование электронных возбуждений и структурной трансформации графита при его облучении высокоэнергетическим ионом Хе методом TDDFT МФТИ, 4 курс		
14	Мирошниченко Кирилл Дмитриевич	12:51–13:01
Предсказание значения лапласиана электронной плотности в критической точке разрываемой связи кислород-фосфор при ферментативном фосфатном гидролизе с использованием методов машинного обучения МГУ, 4 курс		

Обеденный перерыв

13:01–14:00

15	Гордиенко Дмитрий Владимирович	14:00–14:12
Анализ межфазных границ электролит/графен/золото в несорбирующемся растворе при варьировании потенциала поверхности МФТИ, 5 курс		
16	Чичеватов Глеб Дмитриевич	14:12–14:27
Роль точечных дефектов в кинетике роста оксидных пленок Fe-Cr-шпинелей из DFT+U-расчетов и анализа экспериментальных данных МФТИ, аспирант		
17	Шистко Степан Александрович	14:27–14:37
Форма границы раздела поверхностей жидкость-жидкость в узких порах при произвольном соотношении сторон ячейки симуляции МФТИ, 2 курс		
18	Гречко Егор Алексеевич	14:37–14:47
Моделирование квазикристаллов биграфена методом плиточного замощения для анализа центров нуклеации алмаза МФТИ, 4 курс		

19	Демченко Максим Алексеевич	14:47–14:59
Моделирование термодинамических функций состояния твёрдого неона МГУ, 6 курс		
20	Копытов Иван Максимович	14:59–15:11
Молекулярно-динамические расчеты транспортных свойств водных растворов NaCl: влияние ионных параметров и термодинамических условий МФТИ, 6 курс		
21	Белкина Кристина Артемовна	15:11–15:23
Оптимизация морфологий растворов амфифильных сополимеров с использованием крупнозернистого моделирования МФТИ, 6 курс		
22	Лобашев Егор Андреевич	15:23–15:38
Расчёт линейного натяжения дислокаций в диоксиде урана МФТИ, аспирант		

Подведение итогов и награждение

15:38–16:00