



26 ноября 2020 (четверг)
Онлайн на платформе Zoom
Идентификатор конференции:
958 4369 2077

Председатель:
В. В. Стегайлов
Секретарь:
А. С. Антропов

Программа

(А) - аспирантура, (М) - магистратура, (Б) - бакалавриат

- 1. Владислав Николаев** (А) **11:00**
0 неоднородности конечных систем заряженных макрочастиц в плазме газового разряда
- 2. Илья Воронов** (Б) **11:15**
Неоднородность колебательных свойств в плазменно-пылевом монослое

- 3. Тимофей Миряшкин** (М) **11:27**
Диффузия в многокомпонентных системах
- 4. Кирил Юшин** (Б) **11:39**
Расчет коэффициента диффузии нанометровых полостей в ОЦК железе методом неравновесной молекулярной динамики
- 5. Александр Антропов** (А) **11:51**
Диффузия пузырей ксенона в диоксиде урана

- 6. Денис Потапов** (М) **12:06**
Атомистическое моделирование образования сажевых наночастиц в ходе пиролиза ароматических углеводородов
- 7. Клим Гольдштейн** (М) **12:18**
Механизмы столкновений сажевых частиц с молекулами газообразного окружения
- 8. Михаил Логунов** (А) **12:30**
Молекулярно-динамический анализ процесса порообразования и топологии зацеплений в полимерных нанокompозитах с углеродными нанотрубками
- 9. Станислав Дерка** (Б) **12:45**
Изучение теплофизических свойств аллотропов углерода в области экстремальных температур в рамках методов атомистического моделирования с машинным обучением

- 10. Анастасия Юрченко** (?) **12:57**
Изучение модели липидного бислоя внутренней мембраны митохондрий
(Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова)
- 11. Анна Бутюгина** (Б) **13:09**
Денатурация белка при различных температурах
(Санкт-Петербургский государственный университет)



12. Дмитрий Ленёв (A) 13:21

Поверхностное натяжение межфазных границ алканов

13. Иван Бакулин (M) 13:36

Свойства водного раствора диоксана: метод молекулярной динамики

14. Степан Захаров (A) 13:48

Одномерная модель фильтрации бинарной смеси алканов с ретроградными свойствами

Вкусный Обед ### 14:03 - 15:00

Восстановление сил, обсуждение докладов в чате конференции

15. Валентина Данилова (B) 15:00

Молекулярно-динамическое моделирование влияния ионной жидкости в составе электролита на сольватационные механизмы

16. Сергей Артоболевский (B) 15:12

Расчет структуры наиболее стабильных гетеродимеров метилбензимидазол-2-ил-карбамата

(РХТУ им. Д. И. Менделеева)

17. Максим Благов (A) 15:24

Влияние конформации лиганда на стабилизацию спинового состояния Fe(III) в спин-кроссовер комплексе [Fe(Sal2trien)]⁺ (Московский Государственный Университет)

18. Ярослав Лавриненко (A) 15:39

Модификация метода молекулярной динамики с волновыми пакетами с применением теории функционала плотности для исследования неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества

19. Антон Шипилов (A) 15:54

Исследование влияния вакансий в кристалле кремния на электронные свойства материала в рамках метода GW

20. Дарья Снитовец (M) 16:09

Поиск сокристаллов CL-20 с помощью эволюционного алгоритма USPEX

21. Мария Пахнова (M) 16:21

Предсказание свойств энергетических материалов методами машинного обучения

22. Павел Рачицкий (M) 16:33

Поиск стабильных структур белка в различных силовых полях с помощью эволюционного алгоритма USPEX

Собрание Жюри ### 16:45 - 16:50

Волнительное ожидание, поедание печенок, обсуждение докладов в чате конференции

Награждение. Итоги ### 16:50 - 17:00

Приятные слова и радость от того, что день прошел не зря