

ОТДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИКИ, МАШИНОСТРОЕНИЯ, МЕХАНИКИ
И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ РАН
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РАН
НИУ «ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»
АДМИНИСТРАЦИЯ Г. НОВЫЙ АФОН И НОВОАФОНСКАЯ СРЕДНЯЯ ШКОЛА

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
18-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО
МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

«Foundations of Atomistic Multiscale Modeling and Simulation»

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Петров О.Ф., сопредседатель, ОИВТ РАН/МФТИ, Москва
Норман Г.Э., сопредседатель, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН/МФТИ, Москва
Стегайлов В.В., сопредседатель, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Тимофеев А.В., зам. председателя, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Харабуа Б.А., зам. председателя, зам. главы Администрации г. Новый Афон, Абхазия
Кондратюк Н.Д., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Флейта Д.Ю., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва
Гельчинский Б.Р., Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург
Губин С.А., Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
Ефремов Р.Г., ИБХ РАН/НИУ ВШЭ, Москва
Овчинников С.Г., ИФ СО РАН/СФУ, Красноярск
Рудяк В.Я., СИБСТРИН, Новосибирск
Титов А.В., НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ/СПбГУ, Санкт-Петербург
Фёдоров А.С., ИФ СО РАН/СФУ, Красноярск
Фёдоров М.В., Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва
Филиппов А.В., ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Норман Г.Э.,
Стегайлов В.В.,
Тимофеев А.В.
Кондратюк Н.Д.

ЛОКАЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Харабуа Б.А., Администрация г. Новый Афон
Миканба А.З., Новоафонская средняя школа
Полупанова М.Л., Новоафонская средняя школа
Давыдов В.Н., Новоафонская средняя школа

Веб-сайт Симпозиума <http://jiht.ru/afon22>

Под редакцией

Г. Э. Нормана, В. В. Стегайлова, А. В. Тимофеева, Н. Д. Кондратюка

Благодарим В.В. Писарева, Г.С. Смирнова, Д. Ю. Флейту, М.А. Орехова за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Абдуллина Д.У., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</i> Осаждение атомов и распыление при нормальном падении, моделируемое цепочкой Френкеля-Конторовой	4
<i>Барташевич Е.В., Созыкин С.А., Юшина И.Д.</i> Природа тетрельных связей и их роль в формировании устойчивых взаимодействий в многокомпонентных системах на основе углеродных материалов	4
<i>Белкин А.А., Рафальская Т.А., Рудяк В.Я.</i> О реологических свойствах жидкостей и наножидкостей . . .	5
<i>Брюханов В.М., Байдаков В.Г., Проценко С.П.</i> Кавитация в леннард-джонсовских растворах: молекулярно-динамическое моделирование	6
<i>Варламова Л.А., Ларионов К.В., Сорокин П.Б.</i> Квантово-химическое исследование структуры и стабильности наноразмерных алмазных пленок, пассивированных кислородсодержащими группами.	7
<i>Гергега В.А., Суслов А.В., Степанов Р.С.</i> Одноосная деформация кристаллов висмута	8
<i>Губин С.А., Губина Т.В.</i> Молекулярно-динамическое моделирование критических значений давлений ударных волн для начала химического разложения органических веществ	9
<i>Гуда А.А., Медведев П.В., Солдатов А.В., Русалев Е.В.</i> Создание микрофлюидной системы синтеза с машинным обучением	10
<i>Дещеня В.И., Кондратюк Н.Д., Ланкин А.В., Норман Г.Э.</i> Моделирование водных растворов сахаров методом молекулярной динамики	10
<i>Дмитриев С.В.</i> Делокализованные и пространственно локализованные нелинейные колебания модельных и кристаллических решеток	10
<i>Казаков А.М., Бабичева Р.И., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А.</i> Моделирование взаимодействия дислокаций с препятствиями в ОЦК решетке вольфрама	11
<i>Камаева Л.В., Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М.</i> Химический ближний порядок, вязкость и затвердевание расплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni	11
<i>Кондратюк Н.Д.</i> Квантовая природа ядер через интегралы по траекториям в молекулярной динамике .	12
<i>Савин А.В., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</i> Механика и нелинейная динамика графеновых нанолент на подложке	12
<i>Ланкин А.В.</i> Физические принципы извлечения лития из бедных рассолов	13
<i>Лукашечук В.Г., Ланкин А.В., Норман Г.Э.</i> Молекулярно-динамическое моделирование хлорсодержащего двойного слоистого гидроксида алюминия и лития	14
<i>Норман Г.Э., Саитов И.М.</i> О новом классе фазовых переходов первого рода	15
<i>Писарев В.В., Логунов М.А., Кондратюк Н.Д., Никитюк Б.И.</i> Структурные и транспортные свойства углеводородных жидкостей	15
<i>Полякова П.В., Баимова Ю.А.</i> Анализ влияния морфологии скомканного графена на его механические свойства: атомистическое моделирование	16
<i>Решетняк О. Б., Решетняк В. В., Филиппов А.В.</i> Взаимодействие углеродных наночастиц с алюминием в жидком и кристаллическом состояниях	16
<i>Решетняк В.В., Решетняк О.Б., Филиппов А.В.</i> Кинетика рождения и гибели ион-молекулярных комплексов в плазме влажного воздуха	17
<i>Русалев Ю.В., Гуда А.А.</i> Моделирование механических свойств поверхности методом молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF	17
<i>Савилов Т. М., Ланкин А. В., Смирнов Г. С., Норман Г. Э.</i> Влияние параметров системы на коэффициент диффузии диоксида циркония	18
<i>Смирнов Г.С.</i> Структура железа в условиях внутреннего ядра Земли: классическая и квантовая молекулярная динамика	18
<i>Собалев С.А., Матвейчук Ю.В., Борисова П.И., Барташевич Е.В.</i> Особенности электронных характеристик кристаллов с отрицательной линейной сжимаемостью	19
<i>Сорокина Л.Ю., Варламова Л.А., Сорокин П.Б.</i> Теоретическое изучение стабильности окисленного нитрида бора	19
<i>Степанов Р.С., Гергега В.А., Колобов А.В.</i> Влияние одноосного сжатия на Ван-дер-Ваальсову щель в двумерных халькогенидах	20
<i>Фёдоров А.С., Еремкин Е.В., Высотин М.А.</i> Моделирование плазмонов с переносом заряда в системах из металлических наночастиц на поверхности графена.	20
<i>Филиппов А.В.</i> Потенциал взаимодействия сферических макрочастиц-диэлектриков с сильно отличающимися радиусами	21
<i>Флейта Д.Ю.</i> Температура стеклования и межчастичная динамика биметаллических сплавов на основе никеля	21
<i>Флягина И.С., Марков А.А., Малков А.И.</i> Бориды алюминия Al1.28B и AlB2: изучение энергетики образования в контексте системы Al-B с помощью DFT моделирования	22
<i>Цыганков А.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.</i> Структурно-динамические особенности расплава жидкого висмута: DFT анализ	22
<i>Шепелев И.А., Колесников И.Д., Дмитриев С.В.</i> Динамика возбуждения и распространения ударной волны в слое фосфорена	23
<i>Шутикова М.И., Стегайлов В.В.</i> Расчет свойств точечных дефектов магнетита в рамках теории функционала плотности	23
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	24