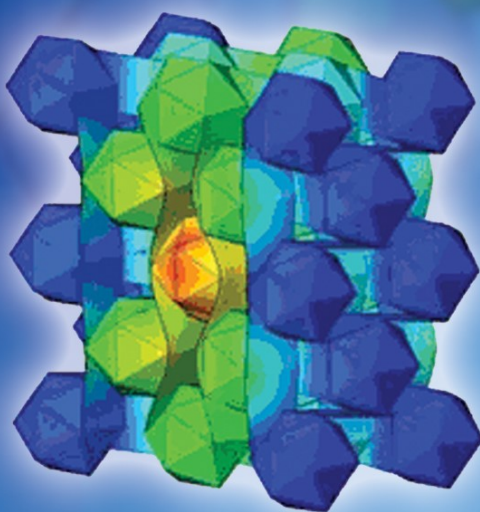


Министерство образования и науки Российской Федерации  
Объединенный институт ядерных исследований  
Московский государственный университет  
имени М. В. Ломоносова  
Тульский государственный педагогический университет  
им. Л. Н. Толстого  
Тульский государственный университет

# **ПРОГРАММА IV МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

## **МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР, СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА, НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ**

**18-21 сентября 2017 г.**



г. Тула, проспект Ленина, 125, учебные корпуса № 2, 3, 4

## **ОРГКОМИТЕТ**

### **Председатель**

**В. А. Панин**, д-р физ.-мат. наук, профессор, ректор Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого

### **Заместители председателя**

**В. Г. Шавров**, д-р физ.-мат. наук, профессор, руководитель лаборатории магнитных явлений в микроэлектронике Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук;

**К. А. Подрезов**, канд. полит. наук, доцент, проректор по научно-исследовательской работе Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого;

**В. Д. Кухарь**, д-р техн. наук, профессор, проректор по научной работе Тульского государственного университета

### **Члены оргкомитета**

Л. И. Королева	МГУ имени М. В. Ломоносова
Е. В. Лукашева	МГУ имени М. В. Ломоносова
Г. В. Маркова	ТулГУ
А. П. Плотников	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
И. В. Шахкельдян	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
И. Ю. Реброва	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
А. Н. Привалов	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
Н. Н. Добровольский	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
Ю. В. Бобылёв	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
Д. А. Нургугеев	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
Р. В. Романов	ТГПУ им. Л. Н. Толстого

## ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

*Председатель программного комитета – С. А. Никитов,*  
д-р физ.-мат. наук, профессор, член-корр. РАН,  
директор Института радиотехники и электроники  
им. В. А. Котельникова Российской академии наук (Москва, Россия)

*Заместитель председателя – В. М. Федосюк,*  
член-корр. НАН Беларуси, д-р физ.-мат. наук,  
старший научный сотрудник, генеральный директор  
Государственного научно-производственного  
объединения «Научно-практический центр  
Национальной академии наук Беларуси  
по материаловедению» (Минск, Беларусь)

### Члены программного комитета

- А. Штернберг** профессор, действительный член Латвийской академии наук, директор Института физики твердого тела Латвийского университета (Рига, Латвия);
- А. М. Гришин** профессор Королевского технологического института (Стокгольм, Швеция);
- Дж. Р. Андерсон** Профессор Мэрилендского университета (Мэриленд, США);
- О. Дулиу** профессор Университета Бухареста, (Бухарест, Румыния);
- Т. Локаичек** заведующий лабораторией Геологического института Чешской академии наук (Прага, Чехия);
- Л. А. Булавин** академик НАН Украины, профессор Национального университета им. Т. Г. Шевченко (Киев, Украина);
- М. С. Хозяинов** заведующий кафедрой Государственного университета «Дубна» (Дубна, Россия);
- А. М. Балагуров** главный научный сотрудник Объединенного института ядерных исследований (Дубна, Россия);

- Т. И. Иванкина** старший научный сотрудник Объединенного института ядерных исследований (Дубна, Россия);
- В. Г. Заводинский** профессор Института материаловедения Хабаровского научного центра Дальневосточного отделения РАН (Хабаровск, Россия);
- В. Н. Чубариков** декан механико-математического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова (Москва, Россия);
- Д. В. Георгиевский** профессор РАН, заведующий кафедрой МГУ имени М. В. Ломоносова (Москва, Россия);
- А. И. Нижников** заведующий кафедрой МПГУ (Москва, Россия);
- Н. В. Сидоров** заведующий сектором лаборатории Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева Кольского научного центра РАН (Апатиты, Россия);
- Д. М. Левин** профессор Тульского государственного университета (Тула, Россия);
- Н. М. Добровольский** заведующий кафедрой Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого (Тула, Россия);
- Ю. Ф. Головнев** профессор Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого (Тула, Россия).

## **17 СЕНТЯБРЯ (воскресенье)**

Заезд и размещение иногородних участников конференции.

## **18 СЕНТЯБРЯ (понедельник)**

### **Регистрация участников конференции**

- 9.00 – 12.00 учебный корпус № 3, аудитория № 92  
(иногородние участники)
- 12.00 – 13.00 учебный корпус № 4, лекторий № 2

### **ОТКРЫТИЕ КОНФЕРЕНЦИИ**

(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

- 13.00 – 13.15 Вступительное слово председателя оргкомитета конференции, ректора ТГПУ им. Л. Н. Толстого д-ра физ.-мат. наук, профессора В. А. Панина
- 13.15 – 13.30 Приветствия участникам конференции

### **ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ**

(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

Председатель – д-р физ.-мат. наук, профессор  
**Н. М. Добровольский**

- 13.30 – 14.00 **Артамонов В. А.**  
Полиномиально полные квазигруппы и их приложения для защиты информации
- 14.10 – 14.40 **Левин Д. М.**  
Структурные и магнитные фазовые переходы в манганитах при высоких давлениях
- 14.40 – 15.20 **Кофе-брейк**
- 15.20 – 15.50 **Привалов А. Н., Ларкин Е. В.**  
Сеть Петри – Маркова как инструмент моделирования параллельных процессов

16.00 – 16.30 **Кичанов С. Е., Козленко Д. П., Лукин Е. В., Руткаускас А. В., Савенко Б. Н.**  
Нейтронные исследования конденсированных сред: от межатомных расстояний к миллиметровым неоднородностям

17.10 **Товарищеский ужин**

## **19 СЕНТЯБРЯ (вторник)**

### **Секция 1. Строение и свойства конденсированных сред с особыми физико-химическими свойствами** (учебный корпус № 4, лекторий № 2)

*Председатель* – д-р физ.-мат. наук, профессор **Д. М. Левин**

10.00 – 10.15 **Ермакова Е. В., Опалка Л., Ковачик А., Пуллманова П., Хрубовчак П., Кондела Т., Ваврова К., Кучерка Н.**  
Поиски длинопериодной фазы в модельных липидных структурах верхнего рогового слоя кожи (stratum corneum): нейтронные и рентгеновские исследования

10.20 – 10.35 **Иванкина Т. И., Близнюк Л. А.**  
Связь кристаллографической текстуры со свойствами пьезокерамических материалов на основе системы  $PbZrO_3$ - $PbTiO_3$

10.40 – 10.55 **Дутов М. Н., Фирсова А. В.**  
Температурная зависимость электропроводности водных растворов низко-размерных частиц

11.00 – 11.15 **РусакOVA Е. О.**  
Влияние старения на амплитудные зависимости внутреннего трения в сплавах системы «марганец – медь»

11.20 – 11.35 **Лоскутова А. Д., Шипилов А. А.**  
Исследование наноструктурных материалов методом муара

- 11.35 – 12.00 **Кофе-брейк** (лекторий № 2)
- 12.00 – 12.15 **Володько С.С., Касимцев А. В.,  
Маркова Г. В., Шуйцев А. В.**  
Гидридно-кальциевый синтез интерметаллида TiHfNi с высокотемпературным эффектом памяти формы
- 12.20 – 12.35 **Jabarov S. H., Trukhanov A. V.,  
Trukhanov S. V., Dang N. T.**  
Crystal structure and raman spectra of solid solutions BaFe<sub>12-x</sub>Ga<sub>x</sub>O<sub>19</sub>
- 12.40 – 12.55 **Ismayilova N. A.**  
Ab initio study of the elastic properties of TlInSe<sub>2</sub>
- 13.00 – 13.15 **Клюева Е. С., Маркова Г. В.,  
Гайнулов А. С.**  
Изменение свойств закаленного сплава 36Mn64Cu при вылеживании
- 13.20 – 13.35 **Геворгян А. А., Малеев А. В., Потехин К. А.**  
Использование метода атом-атомных потенциалов при анализе молекулярных упаковок в кристаллах
- 13.40 – 13.55 **Руткаускас А. В., Козленко Д. П., Бурзо Э.,  
Власик П., Кичанов С. Е., Лукин Е. В.,  
Савенко Б. Н., Данг Н. Т.**  
Структурные аспекты формирования магнетизма в интерметаллических соединениях на основе кобальта

**Секция 4. Моделирование в физике**  
(учебный корпус № 3, аудитория № 98)

*Председатель* – д-р физ.-мат. наук, профессор  
**Ю. Ф. Головнев**

- 10.00 – 10.15 **Бобылёв Ю. В., Кузелев М. В., Панин В. А.**  
К линейной теории вынужденного черенковского излучения релятивистским электронным пучком продольных волн в квантовой плазме

- 10.20 – 10.35 **Головнев Ю. Ф., Нургуглеев Д. А.**  
Обменное взаимодействие и поляризованные по спину экситоны в  $\text{EuO}$
- 10.40 – 10.55 **Парамонов А. В., Головнев Ю. Ф.**  
Расчет энергетического спектра сверхрешетки  $\text{SmS-EuS}$  методом огибающей функции в приближении эффективной массы
- 11.00 – 11.15 **Ермолов А. В., Головнев Ю. Ф.**  
Резонансное туннелирование в сверхрешетках, расчет в рамках формализма вторичного квантования
- 11.20 – 11.35 **Головнев Ю. Ф., Власова Я. В.**  
Спин-поляризованные ферромагнитные полупроводники
- 11.35 – 12.00 **Кофе-брейк** (лекторий № 2)
- 12.00 – 12.15 **Бобылёв Ю. В., Грибков А. И., Романов Р. В.**  
О компьютерном моделировании стационарного скин-эффекта
- 12.20 – 12.35 **Заводинский В. Г., Горкуша О. А.**  
Безорбитальный метод квантового моделирования многоатомных систем
- 12.40 – 12.55 **Кузнецов В. Н., Бессонов Л. В.**  
Об одном подходе определения критических значений параметров для некоторого класса нелинейных моделей
- 13.00 – 13.15 **Романов Р. В.**  
Комплект программ для моделирования электромагнитных полей в плазменном волноводе
- 13.20 – 13.35 **Саблин Ю. Ю., Корендясев С. П., Армянинов И. С.**  
Зависимость сопротивления полупроводника от деформации



**Секция 2. Перспективные материалы и технологии  
в производстве новой техники. Новые методики,  
приборы и оборудование для научных исследований**  
(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

*Председатель* – д-р техн. наук, профессор **Г. В. Маркова**

- 14.00 – 14.15     **Семенов Е. А.**  
Современные методы контроля качества на производстве
- 14.20 – 14.35     **Гринберг Е. М., Честнейшин М. В.,  
Яровицкая А. А., Котенев В. И.**  
Исследование взаимодействия в порошковых композициях Fe-FeCrC, Fe-FeMo
- 14.40 – 14.55     **Юдин С. Н., Касимцев А. В.**  
Влияние технологических параметров гидридно-кальциевого процесса на структурообразование тугоплавкого интерметаллида Nb<sub>3</sub>Al
- 15.00 – 15.15     **Круглов А. А., Бокучава Г. Д.,  
Папушкин И. В.**  
Нейтронная фурье-стресс-дифрактометрия по времени пролета на реакторе ИБР-2 для решения материаловедческих задач
- 15.20 – 15.35     **Фирсова А. В., Мордасов Д. М.,  
Труфанов И. В., Мордасов М. Д.**  
Угловая микроскопия пленок Ленгмюра
- 15.35 – 16.00     **Кофе-брейк** (лекторий № 2)
- 16.00 – 16.15     **Горюнова А. И., Фомичева Н. Б.**  
Количественная оценка структурно-фазовой неоднородности чугунов с помощью фрактального анализа
- 16.20 – 16.35     **Новосветлова Е. Э., Маркова Г. В.**  
Структура, свойства и технологии получения сплавов Ti-Nb

- 16.40 – 16.55 **Парфенов Н. И., Фомичева Н. Б.**  
Изучение коррозионной стойкости напыленных покрытий
- 17.00 – 17.15 **Левин Д. М., Ромашова В. В., Гончаров С. С.**  
Влияние спинодального распада на формирование и рост локальных концентрационных зон в системе Mn-Cu
- 17.20 – 17.35 **Радченко С. А.**  
Проблемы повышения экспортного потенциала предприятий и эффективный наименее затратный способ их решения
- 17.40 – 17.55 **Шуйцев А. В., Маркова Г. В., Касимцев А. В.**  
Механическая спектроскопия порошкового деформированного интерметаллида TiNi1

**Секция 5. Моделирование в химии и биологии**  
(учебный корпус № 2, аудитория № 60)

*Председатель* – д-р хим. наук, профессор **Ю. М. Атрощенко**

- 14.00 – 14.15 **Кизим Н. Ф., Голубина Е. Н.**  
Структура и свойства солей металлов с Д2ЭГФК, самопроизвольно возникающих в межфазном слое
- 14.20 – 14.35 **Дубинин М. С., Короткова А. А.**  
Моделирование влияния электромагнитного излучения ЛЭП на размеры *Roesilus cupreus* L.
- 14.40 – 14.55 **Мухторов А. Г., Блохин И. В.,  
Никитенко Е. Н., Атрощенко Ю. М.,  
Шажкельдян И. В.**  
Квантово-химическое моделирование взаимодействия N-(2-гидрокси-3,5-динитрофенил) формамида с тетрагидридоборат-ионом
- 15.00 – 15.15 **Сурова И. И., Блохин И. В.,  
Атрощенко Ю. М., Шажкельдян И. В.**  
Теоретическое моделирование взаимодействия 2-гидрокси-3,5-динитропиридина и его аниона с тетрагидридоборат-ионом

- 15.20 – 15.35 **Устинов И. И., Блохин И. В.,  
Атрощенко Ю. М., Шахкельдян И. В.**  
Квантово-химическое моделирование реакции  
8-окси-5,7-динитрохинолина с тетрагидридо-  
борат-ионом методом DFT
- 15.40 – 15.55 **Релмасира К. Д., Леонов А. Ю.,  
Маленко П. И.**  
Многомерное моделирование методом молеку-  
лярной динамики диффузионных процессов в  
поверхностных слоях никотрированных теп-  
лостойких сталей при трении скольжения с  
ресурсным смазыванием
- 16.00 – 16.15 **Исаева Н. М., Добрынина И. В.**  
О статистическом моделировании  
биологических процессов

### **20 СЕНТЯБРЯ (среда)**

- 10.00 – 15.00 **Культурная программа**
- 15.00 – 18.00 **Стендовая сессия**  
(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

### **21 СЕНТЯБРЯ (четверг)**

#### **Секция 3. Математическое моделирование сложных систем и информационные технологии** (учебный корпус № 4, аудитория № 302)

*Председатель* – д-р физ.-мат. наук, профессор  
**Н. М. Добровольский**

- 10.00 – 10.15 **Выжгин Д. Ю., Денисов И. В.**  
О соотношении асимптотических и численных  
методов
- 10.20 – 10.35 **Родионов А. В., Денисов И. В.**  
Сингулярно возмущенные параболические  
уравнения

- 10.40 – 10.55 **Ванькова В. С., Мартынюк Ю. М., Ваньков Б. П., Даниленко С. В.**  
Моделирование информационной системы «Ученый совет университета»
- 11.00 – 11.15 **Мордасов М. Д., Фирсова А. В., Мордасов Д. М.**  
Влияние ковалентности химической связи дисперсной фазы порошковых систем на их фрактальную размерность
- 11.20 – 11.35 **Шутов А. В., Малеев А. В., Вилкова А. Е.**  
Сферический гармонический анализ внешней формы молекул
- 11.40 – 11.55 **Добровольский Н. М., Реброва И. Ю.**  
Теоретико-числовые методы приближенного анализа
- 12.00 – 12.15 **Добровольский Н. Н., Киреева Е. Д., Тительман А. Г.**  
ПОИВС: Многомерные сетки Смоляка – свойства и приложения
- 12.20 – 12.35 **Басалов Ю. А.**  
Компьютерное моделирование и неполные частные кубических иррациональностей
- 12.40 – 12.55 **Родионов А. В.**  
О рациональных приближениях алгебраических сеток

**Секция 6. Проблемы и направления развития естественнонаучного образования**  
(учебный корпус № 4, аудитория № 304)

*Председатель* – д-р физ.-мат. наук, профессор **И. Н. Балаба**

- 10.00 – 10.15 **Ваныкина Г. В., Сундукова Т. О.**  
Модельный подход в современном математическом образовании

- 10.20 – 10.35 **Бобылёв Ю. В., Грибков А. И., Романов Р. В.**  
Об одном способе мотивации интереса к изучению физики
- 10.40 – 10.55 **Плешакова Н. А., Новикова В. В.**  
Активизация познавательной деятельности студентов в процессе освоения учебной дисциплины «Методика обучения предметам: методика обучения физике»
- 11.00 – 11.15 **Реброва И. Ю., Добровольский Н. М., Балаба И. Н., Добровольский Н.Н.**  
Проблемно-ориентированные информационные ресурсы «Современная наука глазами школьников»
- 11.20 – 11.35 **Шорина И. А., Добрынина И. В., Манохин Е. В.**  
О проблеме профессионального самоопределения старшеклассников
- 11.40 – 11.55 **Дмитриев В. Ф.**  
О вращении планет
- 12.00 – 12.15 **Балаба И. Н., Бабич А. А.**  
Математические соревнования и конкурсы как фактор активизации исследовательской деятельности школьников
- 12.20 – 12.35 **Трусова Ю. Н., Добрынина И. В., Исаева Н. М.**  
Использование информационных технологий для повышения эффективности обучения дисциплине «Теория вероятностей и математическая статистика»
- 12.40 – 12.55 **Даниленко С. В., Мартынюк Ю. М., Ванькова В. С., Титов А. В.**  
Игровые технологии в обучении программированию

**21 СЕНТЯБРЯ (четверг)**

14.00 – 16.00

**Подведение итогов конференции**  
(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

## СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

### Секция 1. Строение и свойства конденсированных сред с особыми физико-химическими свойствами

**Дутов М. Н., Фирсова А. В.**

Исследование свойств тонкого слоя воды с углеродными нанобъектами

**Лоскутова А. Д., Королев А. П.**

Исследование электрофизических свойств композита железо – карбид вольфрама

**Сергеева А. В., Грачев С. П., Сергеев Д. Г.**

Подбор параметров материалов при исследовании частотных характеристик деталей в системах инженерного анализа

**Лоскутова А. Д., Саблин Ю. Ю.**

Устройство на полупроводниковых тензодатчиках

**Скворцов А. И., Сергеева А. В.**

Структура и физико-механические свойства сверхпластичного сплава Zn–23%Al в зависимости от степени пластической деформации

### Секция 2. Перспективные материалы и технологии в производстве новой техники. Новые методики, приборы и оборудование для научных исследований

**Радченко С. А.**

Возможности использования современных технологий для защиты людей при отключениях тепла и ЧС и повышения экспортного потенциала

**Макарчук М. В.**

Температурная зависимость электрофизических свойств образцов из монокристаллического и пористого кремния

**Королев А. П.**

Подзатворное квантование в полевой полупроводниковой структуре

**Маркова Г. В., Барынин В. В., Дружинин А. Н.**

Эффект памяти формы в порошковых сплавах «никель-титан»

**Хозяинов М. С., Якушина О. А., Кожевников Д. А.**

Изучение керна нефтяных пластов методом компьютерной томографии

**Тихонова И. В., Титова Ю. Е.**

Концентрационный диапазон высокотемпературного рас-  
слоения в сплавах Fe-Cr и Fe-Mo

### **Секция 3. Математическое моделирование сложных систем и информационные технологии**

**Привалов А. Н.**

Методика и алгоритм расчета характеристик процессов изменений напряженно-деформированного состояния при малых деформациях материалов, получаемых при использовании аддитивных технологий

**Серавкин К. Г., Малеев А. В., Шутов А. В.**

Перебор периодических упаковок поликубов методом дискретного моделирования

**Гладких И. Ю.**

Формализация критериев к наборам данных и процессу тестирования программ в системах автоматизированного тестирования

**Рарова Е. М.**

Тригонометрические суммы алгебраических сеток

### **Секция 4. Моделирование в физике**

**Головнев Ю. Ф., Нургулеев Д. А.**

Туннельный ток в гетероструктуре  $\text{EuO}_{1,06}/\text{Sr}_{0,94}\text{O}_{0,06}$

**Никольская Л. В., Головнев Ю. Ф.**

Расчет энергетического спектра сверхрешетки PbS-EuS в рамках метода огибающей функции в приближении эффективной массы

**Бобылёв Ю. В., Грибков А. И., Романов Р. В.**

Особенности скин-эффекта в плоской и цилиндрической геометриях при низких частотах



**Кабалдин Ю. Г., Заводинский В. Г.**

Компьютерное исследование влияния примесей  
на прочность поликристаллического  $\alpha$ -Fe

**Саблин Ю. Ю., Корендясев С. П., Армянинов И. С.**

Структура полевого датчика деформации

### **Секция 5. Моделирование в химии и биологии**

**Григорьев А. В., Малеев А. В.**

Использование метода дискретного моделирования  
упаковок при расшифровке структур молекулярных  
кристаллов, содержащих сольватные молекулы

**Хлытин Н. В., Блохин И. В., Атрощенко Ю. М.,**

**Шахкельдян И. В.**

Моделирование реакций нуклеофильного замещения  
в ряду 2,3-дихлорпиразина методом теории  
функционала плотности