

Министерство образования и науки Российской Федерации
Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова
Российской академии наук

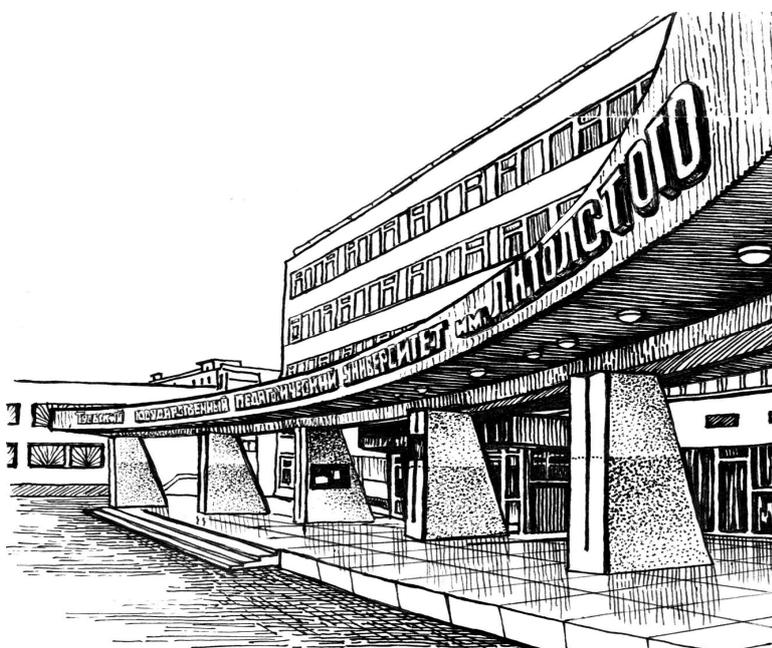
Московский государственный университет
имени М. В. Ломоносова

Тульский государственный педагогический университет
им. Л.Н. Толстого

Тульский государственный университет
Российская академия естественных наук

ПРОГРАММА
III Международной научной
конференции
«Моделирование структур,
строение вещества,
нанотехнологии»

18–21 апреля 2016 года



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

Тула – 2016

*Конференция проводится при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований,
проект №16-02-20120*

Оргкомитет

Председатель

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

Заместители председателя

С. А. Никитов, д-р физ.-мат. наук, профессор, член-кор. РАН, директор Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук;

В. Г. Шаэров, 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;

Ю. Ф. Головнев, д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры общей и теоретической физики факультета математики, физики и информатики Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого.

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
Р. Н. Ростовцев	ТулГУ
И. А. Клепинина	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
Ю. В. Бобылев	ТГПУ им. Л. Н. Толстого
Д. А. Нургулеев	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-кор. РАН,
директор Института радиотехники и электроники
им. В. А. Котельникова Российской академии наук, Москва.

Заместитель председателя – В. М. Федосюк,
чл.-кор. НАН Беларуси, д-р физ.-мат. наук, с. н. с.,
Генеральный директор Государственного научно-
производственного объединения «Научно-практический центр
Национальной академии наук Беларуси по материаловедению»,
Минск.

Члены программного комитета

- А. Штернберг** профессор, действительный член Латвийской академии наук, директор Института физики твердого тела Латвийского университета, г. Рига, Латвия;
- А. М. Гришин** профессор Королевского технологического института, г. Стокгольм, Швеция;
- Дж. Р. Андерсон** профессор Мэрилендского университета, г. Мэриленд, США;
- Ф. Альбертини** профессор, заведующий лабораторией Института материалов для электроники и магнетизма Центра национальных исследований Италии, г. Парма, Италия;
- Б. Эрнандо** профессор, заведующий кафедрой университета г. Овиедо, Испания;
- М. Топик** профессор Кейптаунского университета, заведующий отделом Национальной Лаборатории ЮАР "Надежда", ЮАР;
- Н. В. Сидоров** заведующий сектором лаборатории материалов электронной техники Института химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева Кольского научного центра РАН, г. Апатиты, Россия

К. Борманис

ведущий исследователь Института физики твердого тела Латвийского университета, г. Рига, Латвия;

Н. М. Добровольский

профессор Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого, г. Тула, Россия;

Ю. Ф. Головнев

профессор Тульского государственного педагогического университета им. Л. Н. Толстого, г. Тула, Россия;

М. Х. Машаев

сотрудник Туркменского государственного университета имени Махтумкули, г. Ашхабад, Туркмения.

17 апреля

Заезд и размещение иногородних участников в гостинице.

18 апреля

10.00–11.00 **Регистрация участников конференции**

11.00–11.30 **ОТКРЫТИЕ КОНФЕРЕНЦИИ**
(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

Вступительное слово председателя оргкомитета конференции, ректора ТГПУ им. А. Н. Толстого д-ра физ.-мат. наук, проф. **В. А. Панина**

Приветствия участникам конференции

11.30–14.00 **ПЛЕНАРНОЕ ЗАСЕДАНИЕ**
(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

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

**Борманис К., Штернберг А., Сидоров Н. В.,
Палатников М. Н., Теплякова Н. А.**

Структурные фазовые переходы в твердых растворах $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{TaNb}_{1-y}\text{O}_3$.

**Шавров В. Г., Жихарев А. М., Иржак А. В.,
Каманцев А. П., Коледов В. В., Лега П. В.,
Мазаев П. В., Маширов П. В., Шеляков А. В.**

Эффект памяти формы в микро- и наномеханике.

Сидоров Н. В., Палатников М. Н.

Нелинейно-оптические монокристаллы ниобата лития с низким эффектом фоторефракции: синтез, структура, свойства.

Головнев Ю. Ф.

Магнитные экситоны в наносистемах ферромагнитный полупроводник – парамагнитный полупроводник.

12.30–13.00 **Кофе-брейк**

16.00 **Товарищеский ужин**

19 апреля

10.00–12.00 **Секция 1. Моделирование структур**
(учебный корпус № 4, лекторий 2)

Председатель – д-р физ.-мат. наук, проф.
И.В. Денисов

Геворгян А. А., Игонин В. А., Малеев А. В., Потехин К. А.
Сравнение молекулярных упаковок кристаллических структур двух хиральных лигандов.

Денисов И. В., Денисов А. И.
Угловой пограничный слой в сингулярно возмущенных параболических задачах.

Елисеева С. В., Евсеев Д. А., Семенцов Д. И.
Оптические свойства одномерного графенового фотонного кристалла с дефектом инверсии.

Завгородняя М. И., Лавров И. В.
Моделирование частотных диэлектрических характеристик пористого кремния.

Кудрейко А. А., Мигранова Д. Н., Мигранов Н. Г.
Динамика переключения электрическим полем сегнетоэлектрических жидких кристаллов типа SmC*.

Макрушин Н. А., Ермаков А. И., Дульнев А. И., Гартман В. Л.
Квантово-химическое моделирование структур силицидов никеля.

Мельников Г. А., Игнатенко Н. М., Мельников В. Г., Черкасов Е. Н., Манжос О. А.
Квазикристаллическое строение кластерных систем и наночастиц.

10.00–12.00

**Секция 2. Наноразмерные
гетеросистемы**

(учебный корпус № 3, аудитория 98)

Председатель – канд. физ.-мат. наук, доц.
Д. А. Нургулеев

**Волгин В. М., Любимов В. В., Гнидина И. В.,
Кабанова Т. Б., Давыдов А.Д.**

Моделирование электроосаждения металлических нанопроволочек в матрицу с переменной пористостью.

Головнев Ю. Ф., Лаковцев А. Б., Нургулеев Д. А.

Практическое применение наносистем ферромагнитный полупроводник – парамагнитные полупроводник.

Головнев Ю. Ф., Нургулеев Д. А.

Анализ кинетической модели двойной квантовой ямы EuO-SrO-EuO .

Головнев Ю. Ф., Нургулеев Д. А.

Гигантское спиновое расщепление экситонных состояний в нанослое EuO .

Головнев Ю. Ф., Нургулеев Д. А.

Обменное взаимодействие и триплетные экситоны в наноразмерной системе EuO .

Ермолов А. В., Головнев Ю. Ф., Нургулеев Д. А.

Энергетические диаграммы гетеропереходов PbS-EuS и SmS-EuS .

**Королева Л. И., Морозов А. С., Жакина Э. С.,
Баташев И. К., Балбашов А. М.**

Влияние магнитно-неоднородного состояния на магнетокалорический эффект в манганитах.

10.00–12.00 **Секция 4. Системы с особыми физико-химическими свойствами**
(учебный корпус № 2, аудитория № 60)

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

Демидов В. Н., Сухаржевский С. М., Веденеева Л. Н.

ЭПР электрон-избыточных биоактивных наноразмерных пурпурных 1,10-фенантроцианинов Zn(II): температурные зависимости концентрации радикальных центров.

Кизим Н. Ф., Голубина Е. Н., Синюгина Е. В.

Свойства ультрадисперсных систем на основе ди-(2-этилгексил)фосфатов.

Мухторов Л. Г., Устинов И. И., Блохин И. В., Хохлова И. И., Атрощенко Ю. М., Шахкельдян И. В.

Квантово-химическое моделирование реакций нитропроизводных бензоксазолов с нуклеофилами.

Мухторов Л. Г., Устинов И. И., Блохин И. В., Атрощенко Ю. М., Шахкельдян И. В., Зорова А. К.

Синтез и молекулярная структура 7-метил-5,9-динитрооктагидро-1Н-5,9-метано[1,4]оксазино[2,3-d]азоцин-2(3Н)-она.

Радченко С. А., Радченко С. С.

Взаимосвязь нано- и макропористости ископаемых углей с газодинамическими явлениями в шахтах.

Свирская Л. М.

Высокопроводящее состояние в низкоразмерных системах.

Сурова И. И., Иванова Е. В., Атрощенко Ю. М., Шахкельдян И. В.

Моно- и бициклические аддукты 3,5-динитропиридина в синтезе полифункциональных гетероциклических соединений.

10.00–12.00 **Секция 6. Моделирование в биологии**
(учебный корпус № 2, аудитория № 58)

Председатель – д-р биол. наук, проф.
А. А. Короткова

**Короткова А. А., Булухто Н. П.,
Мамонтов С. Н., Дубинин М. С.**

Моделирование трофической структуры элементов энтомофауны.

Постолаки А. И.

Биоматематические законы развития и формообразования
зубочелюстно-лицевой системы человека.

Сидоров М. А.

Природоподобная нанотехнология для энергетики.

Смирнова М. Ю.

Влияние ультрадисперсного селена на естественный патоморфоз
фиброзно-кистозной болезни.

12.00–13.00 **Перерыв (кофе-брейк)**

13.00–15.00 **Секция 3. Свойства наноматериалов**
(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

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

**Алпатов А. В., Вихров С. П., Вишняков Н. В.,
Рыбин Н. Б., Рыбина Н. В.**

Методы исследования структуры поверхности тонких пленок.

Бобков А. А., Налимова С. С., Мошников В. А.

Исследование нанообъектов со структурой перколяционного
кластера.

Борисовский П. А., Киселев Г. В., Моос Е. Н., Руденко А. И.

Особенность поведения углерода на электродах вакуумной
и плазменной электроники.

**Волгин В. М., Любимов В. В., Гнидина И. В.,
Кабанова Т. Б., Давыдов А. Д.**

Моделирование электроосаждения металла через маску из моно-
слойного коллоидного кристалла.

Евсеев Д. А., Елисеева С. В., Семенцов Д. И.

Поверхностные волны в структуре графен-диэлектрик.

Клюева Е. С., Маркова Г. В., Гайнулов А. С.

Распад γ -твдого раствора сплава $36Mn64Cu$ при старении.

13.00–15.00

Секция 5. Моделирование в физике
(учебный корпус № 3, аудитория № 98)

Председатель – д-р физ.-мат. наук, проф.
Ю. В. Бобылёв

**Астров М. С., Черногубовский М. А.,
Родин И. Ю., Запретилина Е. Р.**

Моделирование нестационарного возбуждения при измерениях
переходных характеристик сверхпроводников.

Бобылёв Ю. В., Борисов В. В., Панин В. А., Романов Р. В.

Численный анализ автоколебаний на примере уравнения Ван
дер Поля.

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

Компьютерное моделирование физических процессов.

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

Использование метода фазовой плоскости и фурье-анализа при
изучении колебательных процессов в педвузе.

Бобылёв Ю. В., Панин В. А., Романов Р. В., Тюрина М. О.

Движение заряженных частиц в магнитных ловушках разных
конфигураций.

Бондарев А. В., Батаронов И. Л., Бармин Ю. В.

Атомная структура аморфных сплавов на основе редкоземель-
ных металлов.

Бондарев А. В., Батаронов И. Л.

Моделирование магнитных свойств аморфных сплавов на основе редкоземельных металлов.

Княщук А. А., Баян Е. М., Лупейко Т. Г.

Свойства наноматериалов на основе диоксида титана, модифицированного ионами железа(III).

16.00–18.00

Стендовая сессия

(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

20 апреля

10.00–12.00

**Секция 7. Информационно-
вычислительные системы**

**Секция 8. Направления развития
естественнонаучного образования**
(учебный корпус № 3, аудитория № 98)

Председатель – канд. техн. наук, доц.
И. А. Клепинина

Дмитриев В.Ф.

Определение понятия «энтропия» в физике и информатике.

Кормачева А. Н., Добрынина И. В.

О математических методах определения эффективности использования информационно-коммуникационных технологий в предметной подготовке магистрантов.

Кустов А. И., Зеленев В. М., Мигель И. А.

Модернизация современного естественнонаучного образования на основе выявления и развития его перспективных направлений.

Плешакова Н. Л., Клепинина И. А.

Проблемы реализации интегративного подхода при подготовке магистров по программе «Практическое естествознание».

Радченко С. А., Радченко С. С.

Возможности совершенствования естественнонаучного образования с учетом лучшего мирового опыта.

Радченко С. А.

Метод комплексного решения проблем улучшения обучения молодежи и повышения квалификации преподавателей вузов и учителей школ.

12.00–15.00

Культурная программа

(Посещение Государственного мемориального и природного заповедника «Музей-усадьба Л. Н. Толстого “Ясная Поляна”)

21 апреля

10.00–11.00

Подведение итогов конференции

(учебный корпус № 4, лекторий № 2)

15.00–18.00

Культурная программа

(Посещение Тульского государственного музея оружия; посещение Тульского кремля)

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Секция 1. Моделирование структур

Мельников Г. А., Игнатенко Н. М., Мельников В. Г.,

Черкасов Е. Н., Манжос О. А.

Критерий плавления Линдемана для кристаллов, наночастиц и кластеров в рамках кластерной модели.

Моос Е. Н., Савушкин О. В.

Осцилляции Фриделя в одномерной квантовой линии.

Назипов Д. В., Никифоров А. Е., Чернышев В. А.

Ab initio исследование обменного взаимодействия в $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$, $\text{Y}_2\text{V}_2\text{O}_7$.

Петров В. П., Чернышев В. А., Никифоров А. Е.

Колебательный спектр ферроборатов $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$: ab initio моделирование.

Чернышев В. А., Петров В. П., Никифоров А. Е.

Структура и динамика решетки кристаллов, допированных редкоземельными ионами: первопринципный расчет.

Шутов А. В., Малеев А. В.

Кластеры и координационные окружения в квазипериодических структурах.

Секция 2. Наноразмерные гетеросистемы

Никольская Л. В., Головнев Ю. Ф.,

Парамонов А. В., Нургуглеев Д. А.

Расчет минизонной структуры закрытых квантовых ям в сверхрешетке PbS-EuS .

Оразов Г.

Зависящие от интенсивности нелинейно-оптические эффекты в фоторефрактивных кристаллах.

Секция 3. Свойства наноматериалов

Курбонов Н. Б., Курбонов Г. Б.

Исследование влияние наноуглеродных материалов на механические и тепловые свойства полиамида-6.

Куручкин А. И., Волгин В. М., Грачев О. Е.

Электроэрозионная обработка микрополостей в кремнии с использованием пакетов высокочастотных импульсов.

Кустов А. И., Зеленев В. М., Мигель И. А.

АМД-методы как средство изучения структуры и оценки свойств наноматериалов.

**Мальтанова А. М., Позняк С. К., Старикевич М. С.,
Гаевская Т. В.**

Электрокаталитические свойства плотных и мезопористых пленок TiO_2 в реакции восстановления кислорода.

Новосветлова Е. Э., Маркова Г. В.

Температурный спектр внутреннего трения сплава Ti-Nb-Ta.

**Семенов А. Л., Гаврилюк А. А., Середкин А. С.,
Моховиков А. Ю., Морозова Н. В., Голыгин Е. А.,
Гаврилюк Б. В., Кокорин В. И.**

Влияние пластической деформации на магнитные и магнитоупругие характеристики быстрозакаленных наноструктурированных ферромагнетиков.

Тарасова Н. В., Силина Д. Г., Салтыков С. Н.

Электроосаждение нанокристаллических цинковых покрытий в условиях импульсного электролиза.

Усольцева Н. В., Коробочкин В. В.

О влиянии природы медьсодержащих соединений на пористую структуру продуктов неравновесного электрохимического окисления меди и алюминия.

Шиляева Ю. И., Бардушкин В. В., Яковлев В. Б.

Прогнозирование предельных значений прочностных показателей метаматериалов на основе пористого анодного оксида алюминия.

Секция 4. Системы с особыми физико-химическими свойствами

**Сурова И. И., Иванова Е. В., Атрощенко Ю. М.,
Чудакова А. А., Печенкина Т. В.**

Синтез и конформационный анализ 3,7-диазабицикло[3.3.1]нонанов.

**Устинов И. И., Блохин И. В., Атрощенко Ю. М.,
Шахкельдян И. В.**

Молекулярный дизайн нитропроизводных хинолина.

**Чилачава К. Б., Васильева К. В., Швыкин А. Ю.,
Бойкова О. И., Атрощенко Ю. М.**

Исследование минеральной и органической составляющей табачных изделий.

**Швыкин А. Ю., Чилачава К. Б., Атрощенко Ю. М.,
Данелян Э. Д., Гордиенко Д. О., Чвыков П. А.**

Химическая модификация гуминовых кислот торфа природными и синтетическими регуляторами роста растений и сравнительное изучение биологической активности полученных модификантов.

**Швыкин А. Ю., Чилачава К. Б., Атрощенко Ю. М.,
Данелян Э. Д.**

Химическая модификация гуминовых кислот торфа реакциями оксиметилирования и изучение сорбционной способности полученных модификантов по отношению к катионам тяжелых металлов.

Секция 5. Моделирование в физике

**Болгин В. М., Любимов В. В., Гнидина И. В.,
Кабанова Т. Б., Давыдов А. Д.**

Моделирование анодного растворения металла через маску из монослойного коллоидного кристалла.

Ельникова Л. В.

Оценки дефектной структуры железо-галлиевых сплавов в рамках модели захвата позитронов.

Жигунов В. В.

Математическое моделирование диффузионных процессов в бинарных дисперсных металлических системах.

Клепинина И. А., Бурцева Ю. В.

Математическое моделирование диффузионного процесса при произвольном распределении компонентов.

Колмаков Ю. Н., Левин Д. М.

Проявления аномальной диффузии в модели марковского процесса случайных блужданий частиц.

**Левин Д. М., Архангельский С. И.,
Муравлева Л. В., Кузнецова Е. Г.**

Флуктуации концентрации как источник физического уширения дифракционных максимумов.

Ростовцев Р. Н.

Электрохимический метод определения активности железа.