



# Отчет по научно- исследовательской работе

Кафедра вычислительной физики

2016 г.

*Отчет подготовил: ст. преп. С.А. Дёмин*

# Наука



## Формы отчетности

- ежегодный отчет о НИР сотрудников кафедры;
- показатели эффективности работника университета (отчетность - два раза в год);
- **рейтинг ППС (NEW);**
- научная деятельность сотрудников в рамках Программы повышения конкурентоспособности (вхождение в ТОП-100 рейтингов мировых университетов).

# Отчеты по науке



## Ключевые критерии

- Статьи в базах WoS и Scopus;
- Количество цитирований в базах данных WoS и Scopus;
- Привлечение иностранных профессоров, молодых ученых и исследователей;
- Привлечение иностранных студентов и магистрантов;
- Стажировки в ведущих научных и образовательных центрах мира;
- Доля аспирантов и магистрантов;
- Доходы от НИР и НИОКР, в том числе, из внебюджетных источников.

## Приоритетные направления **КФУ**

- биомедицина и фармацевтика;
- нефтедобыча, нефтепереработка, нефтехимия;
- информационные технологии;
- перспективные материалы

## Основные научные направления **ИФ**

- исследования медико-биологических систем физическими методами;
- космические и инфокоммуникационные исследования, технологии, разработка приборов на новых физических принципах;
- физика и инженерия перспективных материалов.

# Отчет о НИР кафедры



## Структура

- Сведения о наиболее важных научных результатах (Word);
- Сведения о публикациях сотрудников кафедры (Word и Excel);
- Дополнительная информация (Excel).

# Наиболее важный научный результат

## 1. Сведения о наиболее значимом научном результате НИР кафедры за отчетный период

*Кафедра вычислительной физики и МФП*

1. Наименование результата: Универсальный метод статистического анализа характеристик фазовых переходов (нуклеации, процесса роста кластеров)

2. Результат научных исследований и разработок (выбрать один из п. 2.1 или п. 2.2)

2.1. Результат фундаментальных научных исследований

- теория	
- метод	+
- гипотеза	
- другое (расшифровать):	

2.2. Результат прикладных научных исследований и экспериментальных разработок

- методика, алгоритм	+
- технология	
- устройство, установка, прибор, механизм	
- вещество, материал, продукт	
- штаммы микроорганизмов, культуры клеток	
- система (управления, регулирования, контроля, проектирования, информационная)	
- программное средство, база данных	
- другое (расшифровать):	

3. Результат получен в Приоритетном направлении развития науки, технологий и техники в Российской Федерации:

- Безопасность и противодействие терроризму	
- Индустрия наносистем	+
- Информационно-телекоммуникационные системы	
- Науки о жизни	
- Перспективные виды вооружения, военной и специальной техники	
- Рациональное природопользование	
- Транспортные и космические системы	
- Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика	

# Наиболее важный научный результат

4. Коды ГРНТИ: 29.17.43, 29.17.41, 29.03.77, 29.19.03

5. Назначение:

Нахождение кинетических параметров, характеризующих процессы зарождения и протекания фазовых переходов (конденсации, кристаллизации, плавления, испарения и т.д.)

6. Описание, характеристики:

Разработанный метод позволяет рассчитывать практически все кинетические параметры, характеризующие фазовые переходы: время жизни метастабильной фазы, время появления первого зародыша новой фазы, скорость зародышеобразования, критический размер зародыша, время индукции. В основе метода используются идеи операции инвертированного усреднения, применяемого к ансамблю экспериментальных траекторий для параметра порядка. Метод может быть использован как при обработке данных традиционных экспериментов (спектроскопии, микроскопии, резонансных методов), так и к данным компьютерного моделирования молекулярной динамики.

7. Преимущества перед известными аналогами:

Метод дает более корректные результаты по сравнению с известными к настоящему времени аналогами: такими как метод Ясуока-Матсумото, метод Бартела-Видекинда, method survival probability.

8. Область применения:

Анализ экспериментальных данных по микроскопии, спектроскопии, резонансных методов, данных компьютерного моделирования молекулярной (атомарной, частичной) динамики.

# Наиболее важный научный результат

## 9. Правовая защита:

Основные результаты, описывающие метод, опубликованы в серии статей:

1. Mokshin A.V. Steady-State Homogeneous Nucleation and Growth of Water Droplets: Extended Numerical Treatment [Text] / Anatolii V. Mokshin, Bulat N. Galimzyanov // The Journal of Physical Chemistry B. – 2012. – V. 116 — P. 11959–11967;
2. Mokshin A.V. Extension of Classical Nucleation Theory for Uniformly Sheared Systems [Text] / A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J.-L. Barrat // Physical Review E. – 2013. – V. 87. – P. 062307(1) – 062307(5);
3. Mokshin A.V. Ordering in Model Metallic Glass upon External Homogeneous Shear [Text] // A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2013. – V. 77, No. 3. – P. 281–283;
4. Mokshin A.V. A Method for Analyzing the Non-Stationary Nucleation and Overall Transition Kinetics. A Case of Water [Text] / Anatolii V. Mokshin, Bulat N. Galimzyanov // The Journal of Chemical Physics. – 2014. – V. 140. – P. 024104(1)–024104(6).
5. Mokshin A.V. Scaling law for crystal nucleation time in glasses [Text] / A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov // J. Chem. Phys. – 2015. – V.142. – P. 104502(1)–104502(10).
6. Galimzyanov B.N. Surface Tension of Water Droplets upon Homogeneous Droplet Nucleation in Water Vapor [Text] / B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin // Colloidal Journal. – 2016. – V. 79, No. 1. – P. 26–34.
7. Галимзянов Б.Н. Основы моделирования молекулярной динамики [Текст]: учебное пособие / Б.Н. Галимзянов., А.В. Мокшин. – Казань: Изд-во КФУ, 2016. – 107 с.

## 10. Стадия готовности к практическому использованию:

Готов

## 11. Авторы:

А.В. Мокшин, Б.Н. Галимзянов



# Организация конференций



Конференция профессорско-преподавательского состава КФУ, секция «Компьютерное моделирование материалов и физических процессов» (кафедра вычислительной физики, 2 февр. 2016 г.). Заседание было приурочено к 85-летию со дня рождения академика Камиля Ахметовича Валиева и 75-летию со дня рождения профессора Рената Музиповича Юльметьева.

# Организационная поддержка конференций

- International Symposium “Lunar Exploration and Space Technology Heritage” (KFU, Kazan, Russia); August 25-30, 2016;
- Summer School «Space Science» (KFU, Kazan, Russia); August 25-27, 2016



# Участие в конференциях

2015 год

Конференции



Доклады

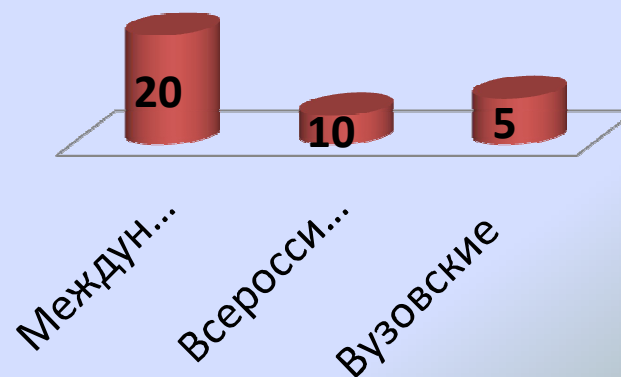


2016 год

Конференции



Доклады



# Перечень конференций:

## Международные

- Международный симпозиум **"Магнитный резонанс: от фундаментальных исследований к практическим приложения"** (В.Е. Воробьева); КФУ, Казань, Россия;
- Международная конференция **"Modern Development of magnetic resonance"** (Современные достижения магнитного резонанса) (В.Е. Воробьева); КФУ, Казань, Россия;
- XXIII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых **"Ломоносов-2016"** (Б.Н. Галимзянов); МГУ, Москва, Россия;
- XVI Международная конференция, школа молодых ученых **"Космическая медицина и биология"** (Ю.А. Нефедьев, С.А. Демин); ИМБП РАН, Москва, Россия;
- 17 Международная солнечная конференция **"Физика солнечной плазмы и активность Солнца"** (С.А. Демин); Крымская астрофизическая обсерватория РАН, п. Научный, Крым;
- Международная молодежная конференция по физике и астрономии **"Физика.СПб-2016"** (С.А. Демин); ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия;
- XXXVI Международная зимняя школа физиков-теоретиков **"Коуровка"** (А.В. Мокшин, Р.М. Хуснутдинов); Институт физики металлов, Екатеринбург, Россия

# Перечень конференций: Международные

- Международная научная конференция "**COSPAR–41st scientific assembly 2016**" (41-я Научная ассамблея "COSPAR-2016") (Ю.А. Нефедьев, С.А. Демин); TUBITAK Space Technologies Research Institute, Istanbul, Turkey;
- Международный конгресс "**European Planetary Science Congress 2016**" (Европейский конгресс по планетным наукам) (Ю.А. Нефедьев, С.А. Демин); Division for Planetary Sciences, American Astronomical Society, Pasadena, CA, USA
- XVII Международная конференция «**Foundation & Advances in Nonlinear Science**» и III Международный симпозиум «**Advances in Nonlinear Photonics**» (Достижения нелинейных наук/Достижения нелинейной фотоники) (С.А. Демин); Belarusian State University, Minsk, Belarus;
- XXIII Международный семинар "**Nonlinear Phenomena in Complex Systems**" (Нелинейные явления в сложных системах) (Ю.А. Нефедьев, С.А. Демин); Joint Institute for Power and Nuclear Research – Sosny National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus;
- Международная конференция "**3rd International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures**" (3-я Международная школа-конференция по оптоэлектронике, фотонике, инженерии наноматериалов, наноструктурам) (С.А. Демин); St. Petersburg Academic University of the Russian Academy of Sciences, Saint–Petersburg, Russia

# Перечень конференций: Всероссийские

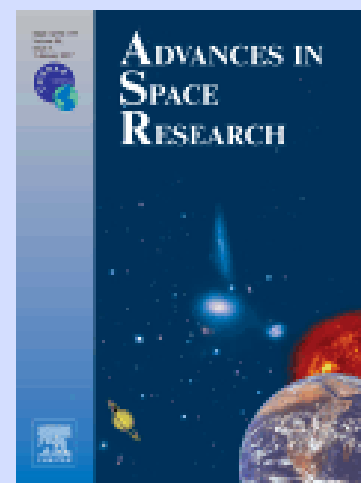
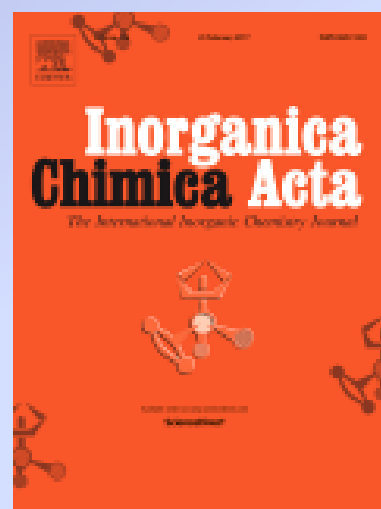
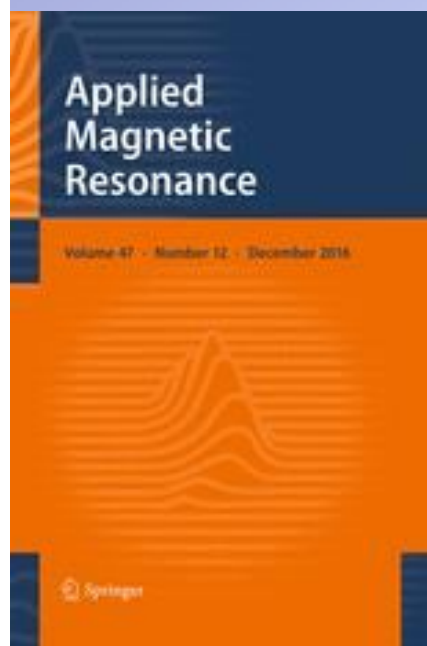
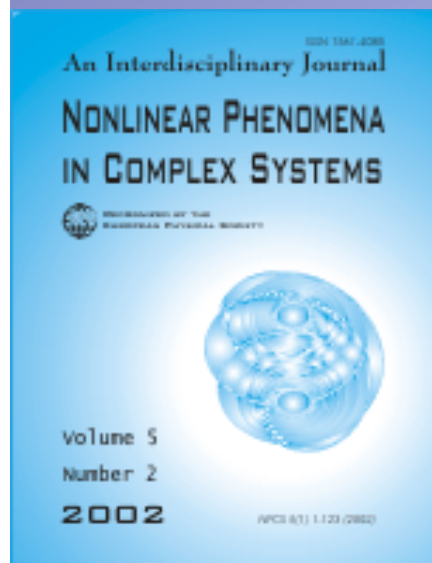
- VII Всероссийская конференция с международным участием **"Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии"** (А.В. Мокшин, Р.М. Хуснутдинов, Б.Н. Галимзянов); Удмуртский госуниверситет, Ижевск, Россия;
- XVII Всероссийская **школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-17)** (А.В. Мокшин, Р.М. Хуснутдинов, Б.Н. Галимзянов); Институт физики металлов, Екатеринбург, Россия;
- XV Школа-конференция **"Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"** (А.В. Мокшин, Р.М. Хуснутдинов, Б.Н. Галимзянов); ИФВД РАН, Сочи, Россия;
- Всероссийский научный семинар Научный семинар **"Динамические корреляции в неупорядоченных многочастичных системах"** (А.В. Мокшин); Институт теоретической физики, Черноголовка. Москва, Россия.



# *Учебные и учебно-методические пособия*

- 1) Галимзянов Б.Н. **Основы моделирования молекулярной динамики** [Текст]: учебное пособие / Б.Н. Галимзянов., А.В. Мокшин. – Казань: Изд-во КФУ, 2016. – 107 с. – Режим доступа: <http://dspace.kpfu.ru/xmlui/handle/net/103814?show=full>.
- 2) Мокшин А.В. **Современная физика** [Текст]: учебно-методическое пособие / А.В. Мокшин, Б.Н. Галимзянов. – Казань: Изд-во КФУ, 2016. – 23 с.
- 3) Нефедьев Ю.А. **Актуальные проблемы современного естествознания** [Электронный ресурс]: учебное пособие / Ю.А. Нефедьев, В.С. Боровских, С.А. Демин [и др.]. – Электрон. дан. – Казань: Изд-во КФУ (Казанский (Приволжский) федеральный университет), 2015. – 198 с. – Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=72809](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=72809). – Загл. с экрана (март, 2016 год).

# ПУБЛИКАЦИИ





# Статьи в изданиях, включенных в базы цитирования WoS, Scopus

- 1) Галимзянов Б.Н. Поверхностное натяжение капель воды при гомогенном капельном зародышеобразовании в водяном паре [Текст] / Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин // **Коллоидный журнал**. – 2016. – Т. 79, № 1. – С. 1–9; [Galimzyanov B.N. Surface Tension of Water Droplets upon Homogeneous Droplet Nucleation in Water Vapor [Text] / B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin // Colloidal Journal. – 2016. – V. 79, No. 1. – P. 26–34].
- 2) Мокшин А.В. Расчет барьера нуклеации и межфазной свободной энергии зародышей новой фазы методом термодинамического интегрирования на основе данных моделирования молекулярной динамики [Текст] / А.В. Мокшин, Б.Н. Галимзянов // **Химическая физика**. – 2016 [принята к публикации].
- 3) Хуснутдинов Р.М. Вязкостные и акустические свойства расплавов AlCu [Текст] / Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин, С.Г. Меншикова, А.Л. Бельтюков, В.И. Ладыанов // **ЖЭТФ**. – 2016. – Т. 149, Вып. 5. – С. 994–1004; [Khusnutdinoff R.M. Viscous and Acoustic Properties of AlCu Melts [Text] / R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin, S.G. Menshikova, A.L. Beltyukov, V.I. Ladyanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2016. – V. 122, No. 5. – P. 859–868].
- 4) Хуснутдинов Р.М. Структурные Особенности и Микроскопическая Динамика Трехкомпонентной Системы Zr<sub>47</sub>Cu<sub>46</sub>Al<sub>7</sub>: Равновесный Расплав, Переохлажденный Расплав, Аморфный Сплав [Текст] / Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин, Р.Е. Рыльцев, Б.А. Клумов, Н.М. Щелкачев // **ЖЭТФ**. – 2016. – Т. 150, Вып. 2. – С. 306; [Khusnutdinoff R.M. Structural Features and the Microscopic Dynamics of the Three-Component Zr<sub>47</sub>Cu<sub>46</sub>Al<sub>7</sub> System: Equilibrium Melt, Supercooled Melt, and Amorphous Alloy [Text] / R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin, B.A. Klumov, R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2016. – V.123, No. 2. – P. 265–276].
- 5) Хуснутдинов Р.М. Микроскопическая коллективная динамика воды [Текст] / Р.М. Хуснутдинов // **Коллоидный журнал**. – 2016. – Т. 78. – С. 208–217.
- 6) Хуснутдинов Р.М. Структурные и Динамические Особенности Воды и Аморфного Льда [Текст] / Р.М. Хуснутдинов // **Коллоидный журнал**. – 2017. – Т. 79, № 1. – С. 104–112.

# Статьи в изданиях, включенных в базы цитирования WoS, Scopus

- 7) Andreev A.O. The fractal method for analysis of macro models of the celestial bodies surface [Text] / A.O. Andreev, N.Y. Demina, S.A. Demin, Y.A. Nefedyev, K.O. Churkin, // **Nonlinear Phenomena in Complex Systems**. – 2016. – V. 19, No. 3. – P. 271–277.
- 8) Andreev A. Problems of the lunar internal structure and gravitational field of cosmic missions [Text] // A. Andreev, Y. Nefedyev, A. Gusev, N. Petrova, N. Demina // **AIAA Space and Astronautics Forum and Exposition**. – 2016. – 7 p.
- 9) Chtchelkatchev N.M. Pade spectroscopy of structural correlation functions: application to liquid gallium [Text] / N.M. Chtchelkatchev, B.A. Klumov, R.E. Ryltsev, R.M. Khusnutdinov, A.V. Mokshin // **Письма в ЖЭТФ**. – 2016. – Т. 103, № 6. – С. 438–443; [JETP Letters. – 2016. – V.103, No. 6. – P. 390–394].
- 10) Demin S.A. Cross MFF–analysis in studying the obsessive-compulsive disorder [Text] / S.A. Demin, O.Y. Panishev, N.Y. Demina // **Journal of Physics: Conference Series**, 3rd International School and Conference “Saint-Petersburg OPEN 2016”, which is chaired by Nobel Prize Laureate in Physics (2000), academician Zhores I. Alferov, March 28–30, 2016, St. Petersburg Academic University - Scientific-Educational Center for Nanotechnology of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia. – 2016. – V. 741. – P. 012073.
- 11) Demin S.A. Statistical analysis of synchronization phenomena in complex systems [Text] / S.A. Demin, O.Y. Panishev, Y.A. Nefedyev, N.Y. Demina // **Journal of Engineering and Applied Sciences**. – 2016 [принята к опубликованию, декабрь, 2016 год].
- 12) Demina N.Y. Methods of the coordinate systems tieing of two images obtained in different reference systems [Text] / N.Y. Demina, A.O. Andreev, S.A. Demin, Y.A. Nefedyev // **Journal of Engineering and Applied Sciences**. – 2016 [принята к опубликованию, декабрь, 2016 год].
- 13) Domracheva N. Magnetic properties of novel dendrimeric spin crossover iron(III) complex [Text] / N. Domracheva, V. Vorobeva, A. Pyataev, A. Ivanova // **Inorganica Chimica Acta**. – 2016. – V. 439. – P. 186–195.

# Статьи в изданиях, включенных в базы цитирования WoS, Scopus

- 14) Domracheva N. Magnetic properties of novel dendrimeric spin crossover iron(III) complex [Text] / N. Domracheva, V. Vorobeva, A. Pyataev, R. Tamura, K. Suzuki, M. Gruzdev, U. Chervonova, A. Kolker // **Appl. Magn. Reson.** – 2016. – V. 47, No. 8. – P. 903–913.
- 15) Khusnutdinoff R.M. Erratum to: Structural features and the microscopic dynamics of the three-component Zr<sub>47</sub>Cu<sub>46</sub>Al<sub>7</sub> system: Equilibrium melt, supercooled melt, and amorphous alloy [Text] / R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin, B.A. Klumov, R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev // **Journal of Experimental and Theoretical Physics.** – 2016. – V. 123, No. 4. – P. 735–735.
- 16) Khusnutdinoff R.M. Local Structural Features of Metallic Alloys: Ni<sub>33</sub>Zr<sub>67</sub> and Ni<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub> [Text] / R.M. Khusnutdinoff // **Acta Physica Polonica A.** – 2016. – V. 129, № 3. – P. 293–296.
- 17) Mokshin A.V. A model solution of the generalized Langevin equation: Emergence and Breaking of Time-Scale Invariance in Single-Particle Dynamics of Liquids [Text] / A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov // **Nonlinear Phenomena in Complex Systems.** – 2016. – V.19, No. 3. – P. 278–285.
- 18) Nefedyeu Y. Making dynamical reference lunar system [Text] / Y. Nefedyeu, A. Andreev, N. Petrova, N. Demina // **AIAA Space and Astronautics Forum and Exposition.** – 2016. – 5 p.
- 19) Nefedyeu Y.A. Application of Antijamming Robust Analysis Method for Selenocentric Reference Net Building [Text] / Y.A. Nefedyeu, V.M. Bezmenov, S.A. Demin, A.O. Andreev, N.Y. Demina // **Nonlinear Phenomena in Complex Systems.** – 2016. – V. 19, No. 1. – P. 102–106.
- 20) Nefedyeu Y.A. History of unique heliometric observations of the Moon's physical libration [Text] / Y.A. Nefedyeu, P. Flin, E. Panko, S.A. Demin, A.O. Andreev, N.Y. Demina // **Indian Journal of Science and Technology.** – 2016 [принята к опубликованию, декабрь, 2016 год].
- 21) Panishev O.Y. The study of frequency behaviour and effects of statistical memory of eeg-signals of a man with bipolar affective disorder [Text] / O.Y. Panishev, S.A. Demin, J. Bhattacharya, N.Y. Demina // **International Journal of Applied Engineering Research.** – 2015. – V. 10, No. 24. – P. 44636–4464 [опубликована, февраль, 2016 год].

# Статьи в изданиях, включенных в базы цитирования WoS, Scopus

- 22) Petrova N.K. Observation of stars from the lunar surface: Estimation inaccuracy of the physical libration parameters in dependence on errors of stellar coordinates in stellar catalogues [Text] / N.K. Petrova, Y.A. Nefediev, H. Hanada // **AIAA Space and Astronautics Forum and Exposition**. – 2016. – 6 p.
- 23) Sokolova M. Analysis of the Lyrids' meteor stream structure for long timeslots [Text] / M. Sokolova, Y. Nefedyev, M. Sergienko, N. Demina, A. Andreev // **Advances in Space Research**. – 2016. – V. 58, No. 4. – P. 541–544.
- 24) Usanin V. Use of long-term models for analysis of comet Encke's motion [Text] / V. Usanin, Y. Nefedyev, A. Andreev // **Advances in Space Research**. – 2016. – V. 58, No. 11. – P. 2400–2406.

# IF журналов

- Inorganica Chimica Acta (2015-**1.918** (Thomson Reuters))
- Advances in Space Research (2015-**1.409** (Thomson Reuters))
- Письма в ЖЭТФ (2015-**1.172** (Thomson Reuters))
- ЖЭТФ (2015-**0.953** (Thomson Reuters))
- Applied Magnetic Resonance (2015-**0.884** (Thomson Reuters))
- Коллоидный журнал(2015-**0.77** (Thomson Reuters))
- Acta Physica Polonica A (2015-**0.525** (Thomson Reuters))
- Химическая физика (2015-**0.438** (Thomson Reuters))
- Indian Journal of Science and Technology (2015-**0.27**(SCImago Journal Rank))
- Nonlinear Phenomena in Complex Systems (2015-**0.232** (SCImago Journal Rank))
- Journal of Physics: Conference Series (2015-**0.211** (SCImago Journal Rank))
- Journal of Engineering and Applied Sciences (2015-**0.2** (SCImago Journal Rank))
- International Journal of Applied Engineering Research (2015-**0.113** (SCImago Journal Rank))

# Яркие достижения

- **А.В. Мокшин.** Получен сертификат эксперта РАН. Распоряжение Президиума РАН от 27.07.2016 "Об утверждении Списка экспертов РАН".
- **А.В. Мокшин.** Победитель конкурса 2016 года на право получения грантов Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук в области знания "Физика и астрономия".
- **Б.Н. Галимзянов.** Защита кандидатской диссертации «Молекулярная динамика процессов зарождения и протекания фазовых переходов в неупорядоченных системах».
- **Р.М. Хуснутдинов.** Лауреат конкурса Академии наук Республики Татарстан для поддержки молодых ученых РТ.

# Яркие достижения

- **Р.М. Хуснутдинов.** Финалист конкурса «Лучший молодой ученый Республики Татарстан – 2016»
- **Б.Н. Галимзянов.** Финалист Республиканского конкурса "Лучший молодой ученый Республики Татарстан - 2015" в номинации "Лучший аспирант в области естественных наук".
- **Б.Н. Галимзянов.** Финалист конкурса на соискание Международной премии им. Е.К. Завойского для молодых ученых в области физики.
- **Г.Р. Тухватуллина.** Лауреат стипендии кафедры вычислительной физики студентам за значительные успехи в научной деятельности и учебе.



# Объекты интеллектуальной собственности

- Мокшин А.В., Галимзянов Б.Н. **«Разработка прикладной расчетной программы по оценке хрупкости аморфных материалов»**, программа для ЭВМ, свидетельство о государственной регистрации № 2016611086 (от 26.01.2016).
- Мокшин А.В., Галимзянов Б.Н. **«Разработка программы по расчету структурных характеристик аморфных систем, испытывающих деформационные взаимодействия»**, программа для ЭВМ, свидетельство о государственной регистрации № 2016615854 (от 01.06.2016).



# Научное сотрудничество

- Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау  
(г. Москва)
- Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина  
(г. Москва, г. Троицк)
- Физико-технический университет УрО РАН (г. Ижевск)
- Омский государственный университет  
им. Ф.М. Достоевского (г. Омск)
- Universität Augsburg (Augsburg, German)
- L'Universite de Lyon (Lyon, France)