



КАФЕДРА
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
ФИЗИКИ



Отчет по научной деятельности кафедры вычислительной физики в первом полугодии 2022 года

Руководитель – д.ф.-м.н., проф.

А.В.Мокшин

Отчет подготовил:

к.ф.-м.н., доц. С.А. Демин

5 июля, 2022 г.

НОВЫЕ НИЛ

1. НИЛ «Информационные технологии в физическом материаловедении» (в рамках программы «Приоритет–2030». Руководитель – глав. науч. сотр., д. ф.-м. н., проф. **Анатолий Васильевич Мокшин**

Цель лаборатории заключается в разработке методологии конструирования материалов и оценки их физико-механических свойств на основе атомарно-молекулярного моделирования и методов машинного обучения.

2. **РНФ-22-169-ВП.** Руководитель – стар. науч. сотр., канд. ф.-м. н., доц. **Рамиль Миннегаязович Хуснутдинов**

Цель состоит в исследовании структурного упорядочения и микроскопической динамики молекулярных жидкостей с нетривиальной геометрией в условиях внешнего воздействия

Ранее созданные НИЛ

- 1. РНФ 19-78.** Руководитель – глав. науч. сотр., д. ф.-м. н., проф. **Анатолий Васильевич Мокшин**

Цель: Теоретические, симуляционные и экспериментальные исследования физико-механических особенностей аморфообразующих систем с неоднородными локальными вязкоупругими свойствами.
- 2. РНФ 20-114.** Руководитель – вед. науч. сотр., д. ф.-м. н., проф. **Юрий Анатольевич Нефедьев**

Цель: Решение фундаментальных проблем небесной механики, космической астрометрии и геофизики Луны, связанных с построением единой динамической селенографической модели, а также взаимосвязанных задач по исследованию внутреннего строения Луны, вращательной динамики, физической либрации и селенографии.

Взаимодействие с крупными научными центрами и лабораториями с целью проведения исследований в рамках проектов:

Руководитель проектов – глав. науч. сотр., д. ф.-м. н., проф.

Анатолий Васильевич Мокшин

**Объединенный Институт Высоких температур РАН;
Научный центр металлургической физики и
материаловедения УдмФИЦ УрО РАН;
Томский государственный университет**

Руководитель проектов – вед. науч. сотр., д. ф.-м. н., проф.

Юрий Анатольевич Нефедьев

**Московский государственный университет им.
М.В.Ломоносова (МГУ);
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.
Вернадского РАН (ГЕОХИ РАН)**

Организация в 2022 году конференций

3-ая Международная конференция «Газоразрядная плазма и синтез наноструктур»

Организаторы: Казанский федеральный университет, КНИТУ-КАИ им. А.Н. Туполева, АН РТ

Цель: Обсуждение актуальных вопросов, касающихся фундаментальных проблем физики газовых разрядов и применения плазмы для синтеза наноструктур.

ПУБЛИКАЦИИ:

• Публикации в российских и зарубежных изданиях, индексируемых базами WoS, Scopus:

1. [Demin, S.A.](#) Flicker-noise spectroscopy analysis of magnetoencephalogram signals in diagnosis and treatment of photosensitive epilepsy / [Sergey A. Demin](#), [Valentin A. Yunusov](#), Sergey F. Timashev // **Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE**. – 2022. – Vol. 12194. – Art. No. 1219402.
doi:10.1117/12.2623095
2. [Demin, S.A.](#) The development of statistical analysis methods for the study of correlations and statistical memory effects in the recorded data of physical experiments / [S.A. Demin](#), V.A. Yunusov // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012038.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012038
3. [Fairushin, I.I.](#) Influence of emitting nanoparticles concentration to the density of free electron in the thermal dusty plasma / [I.I. Fairushin](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012001.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012001
4. [Fairushin, I.I.](#) On the accuracy of analytical solution of the Poisson-Boltzmann equation in the linear approximation / [I.I. Fairushin](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012035.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012035

ПУБЛИКАЦИИ:

• Публикации в российских и зарубежных изданиях, индексируемых базами WoS, Scopus:

5. [Farkhutdinov, A.R.](#) Studies of a monatomic Lennard-Jones system at slow cooling by molecular dynamics simulations and regression analysis / [A.R. Farkhutdinov](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012022.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012022
6. [Khabibullin, R.A.](#) Local density dynamics in a supercritical Lennard-Jones fluid / [R.A. Khabibullin](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012037.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012037
7. [Khabibullin, R.A.](#) Pore formation in simple systems simulated by molecular dynamics / [R.A. Khabibullin](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012043.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012043
8. [Khairullina, R.R.](#) Universal Structural and Dynamic Features in Metals Near Their Melting Points / [R.R. Khairullina, R.M. Khusnutdinoff](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012031.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012031

ПУБЛИКАЦИИ:

• Публикации в российских и зарубежных изданиях, индексируемых базами WoS, Scopus:

9. [Khusnutdinoff, R.M.](#) Is Icosahedral Short-Range Order Presented in Supercooled Transition Metals? / [R.M. Khusnutdinoff](#), [R.R. Khairullina](#), [A.A. Suslov](#), [V.I. Lad'yanov](#), [A.V. Mokshin](#) // **Journal of Physics: Condensed Matter**. – 2022. Принята к опубликованию.
10. [Mokshin, A.V.](#) Self-consistent relaxation theory of collective ion dynamics in Yukawa one-component plasma under intermediate screening regimes // [A.V. Mokshin](#), [I.I. Fairushin](#), [I.M. Tkachenko](#) // **Physical Review E**. – 2022. – V. 105. – P. 025204.
doi: 10.1103/PhysRevE.105.025204
11. [Mokshin, A.V.](#) Thermodynamics of equilibrium alkali plasma. Simple and accurate analytical model for non-trivial case / [A.V. Mokshin](#), [D.A. Mirziyarova](#) // **Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics**. – 2022. – Vol. 424. – P. 127819. doi: 10.1016/j.physleta.2021.127819
11. [Tsygankov, A.A.](#) On the question of the applicability of the principle of thermodynamic similarity in liquid alkali metals / [A.A. Tsygankov](#) // **Journal of Physics: Conference Series**. – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012033.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012033

ПУБЛИКАЦИИ:

• Публикации в российских и зарубежных изданиях, индексируемых базами WoS, Scopus:

13. [Yarullin, D.T.](#) A new approach to estimating kinetic rate factors of phase transformations / [D.T. Yarullin](#) // **Journal of Physics: Conference Series.** – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012054.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012054
14. [Yarullin, D.T.](#) Structural transformations in binary Ni₆₂Nb₃₈ alloy at ultrahigh temperatures / [D.T. Yarullin](#), [M.A. Doronina](#) // **Journal of Physics: Conference Series.** – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012034.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012034
15. [Yunusov, M.B.](#) First-Principle Molecular Dynamics Study of Methane Hydrate / [M.B. Yunusov](#), [R.M. Khusnutdinoff](#) // **Journal of Physics: Conference Series.** – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012052.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012052
16. [Yunusov, V.](#) Spatiotemporal scaling of visually evoked human neuromagnetic signals / [V. Yunusov](#), [S. Demin](#), I. Rusanova, A. Minkin, [A. Elenev](#) // **Proceedings of ITNT 2022 - 8th IEEE International Conference on Information Technology and Nanotechnology.** - 2022. - P. 1-5. Принята к опубликованию.

ПУБЛИКАЦИИ:

• Публикации в российских и зарубежных изданиях, индексируемых базами WoS, Scopus:

17. [Yunusov, V.](#) The analysis of local correlation characteristics of human bioelectric signals while performing cognitive tasks / [V. Yunusov, S. Demin](#) // **Proceedings of ITNT 2022 - 8th IEEE International Conference on Information Technology and Nanotechnology.** - 2022. - P. 1-5. Принята к опубликованию.
18. [Yunusov, V.A.](#) The study of statistical features of the evolution of complex physical systems using adaptive machine learning methods / [V.A. Yunusov, S.A. Demin, A.A. Elenev](#) // **Journal of Physics: Conference Series.** – 2022. – Vol. 2270, No. 1. – P. 012042.
doi: 10.1088/1742-6596/2270/1/012042
19. [Yunusov, V.](#) The study of the self-similar nature of human neuromagnetic responses when exposed to flickering light stimuli / [V. Yunusov, S. Demin, I. Rusanova, N. Demina](#) // **Proceedings of NIR 2021 - IEEE International Conference “Nonlinearity, Information and Robotics”.** – 2021. – P. 1-6. Вышла в январе 2022 года.
doi: 10.1109/NIR52917.2021.9666068.
20. [Yunusov, V.A.](#) The use of the cross-correlation analysis in the search for diagnostic criteria for nocturnal frontal lobe epilepsy / [Valentin A. Yunusov, Sergey A. Demin, Fail M. Gafarov](#) // **Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE.** – 2022. – Vol. 12194. – Art. No. 1219405. DOI:10.1117/12.2625879

ПУБЛИКАЦИИ:

• Публикации в российских и зарубежных изданиях, индексируемых WoS, Scopus, РИНЦ:

21. [Бельтюков, А.Л.](#) Исследование вязкости жидких сплавов алюминий-никель / [А.Л. Бельтюков](#), [И.В. Стерхова](#), [В.И. Ладьянов](#), [Р.М. Хуснутдинов](#), [А.В. Мокшин](#) // **Журнал физической химии**. – 2022. – Принята к опубликованию.
22. [Файрушин, И.И.](#) Влияние электрофизических свойств двухкомпонентных наночастиц на концентрацию электронов в термической пылевой плазме / [И.И. Файрушин](#) // **Теплофизика высоких температур**. – 2022. Принята в печать 07.06.2022.
23. [Юнусов, М.Б.](#) О влиянии гостевых молекул CH₄, C₂H₆, CO₂, Xe и H₂S на стабильность sI-гидрата / [М.Б. Юнусов](#), [Р.М. Хуснутдинов](#) // **Ученые Записки Физического Факультета Московского Университета**. – 2022. Принята к опубликованию.

Кроме того, к опубликованию принят ряд статей в сборники, индексируемые WoS и Scopus: **AIP Conference Proceedings, IEEE Xplore Digital Library** и др.

Наиболее значимые публикации:

Публикация в высокорейтинговом издании (IF=2.707):

[Mokshin A.V.](#) Self-consistent relaxation theory of collective ion dynamics in Yukawa one-component plasma under intermediate screening regimes // [A.V. Mokshin, I.I. Fairushin, I.M. Tkachenko](#) // **Physical Review E**. – 2022. – V. 105. – P. 025204. doi: 10.1103/PhysRevE.105.025204

Публикация в высокорейтинговом издании (IF=2.707):

[Mokshin, A.V.](#) Thermodynamics of equilibrium alkali plasma. Simple and accurate analytical model for non-trivial case / [A.V. Mokshin, D.A. Mirziyarova](#) // **Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics**. – 2022. – Vol. 424. – P. 127819. doi: 10.1016/j.physleta.2021.127819

Публикация в высокорейтинговом издании (IF=2.745):

[Khusnutdinoff R.M.](#) Is Icosahedral Short-Range Order Presented in Supercooled Transition Metals? / [R.M. Khusnutdinoff, R.R. Khairullina, A.A. Suslov, V.I. Lad'yanov, A.V. Mokshin](#) // **Journal of Physics: Condensed Matter**. – 2022. Принята к опубликованию.

Учебные и учебно-методические пособия:

1. **Галимзянов Б.Н.** Сборник задач по курсу «Компьютерный дизайн материалов»: учебно-методическое пособие / **Б.Н. Галимзянов, Г.А. Никифоров.** – Казань: Казан. ун-т, 2022. – 36 с.
2. **Хабибуллин Р.А.** Вычисление динамического структурного фактора на основе данных моделирования классической молекулярной динамики: учебное пособие / **Р. А. Хабибуллин, А. В. Мокшин.** – Казань: Казанский федеральный университет, 2022. – 27 с.

ОИС:

1. **Галимзянов Б.Н., Никифоров Г.А., Мокшин А.В., Программа по вычислительной томографии объемных пористых и однородных материалов / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022661407 (дата 21.06.2022).**
2. **Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В., Программа для создания моделей пористых материалов с заданными параметрами / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022661585 (дата 23.06.2022)**

Сотрудники кафедры (**Хуснутдинов Р.М.**) подали материалы для получения еще **2 Свидетельств о регистрации программ для ЭВМ** (Роспатент, Москва)

Участие в III Республиканской научно-практической конференции им. А.М. Бутлерова

Сотрудники кафедры вычислительной физики к.ф.-м.н., доц. [Хуснутдинов Р.М.](#) и к.ф.-м.н., доц. [Галимзянов Б.Н.](#) приняли участие в качестве членов жюри в III Республиканской научно-практической конференции им. А.М. Бутлерова, которая прошла с 15 по 16 апреля в Лицее № 177 города Казани.

Подробности по ссылкам:

<https://kpfu.ru/physics/struktura/kafedry/kafedra-vychislitelnoj-fiziki/iii-respublikanskoj-nauchno-prakticheskoy-417579.html>

https://vk.com/comp_phys_kpfu?w=wall-165577695_1580



Лекция доцента кафедры вычислительной физики Демина Сергея Анатольевича «Физика сложных систем: От простого к сложному»

Лекция доступна по ссылкам:

<https://www.youtube.com/watch?v=0H4XhETPEv4> (**Univer.TV**)

<https://www.youtube.com/watch?v=WtEqkXQfqwc> (**YouTube-канал ИФ КФУ**)

<https://universmotri.ru/index.php/programms/17-nauka/3155-fizika-slozhnykh-sistem-ot-prostogo-k-slozhnomu-lektsiya-sergeya-demina>
(**universmotri.ru**)

СЕРИЯ НАУЧНО-ПОПУЛЯРНЫХ ЛЕКЦИЙ
ОТ ПРОФЕССОРОВ И ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ
ИНСТИТУТА ФИЗИКИ КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО
УНИВЕРСИТЕТА

**ФИЗИКА
СЛОЖНЫХ
СИСТЕМ:
ОТ ПРОСТОГО К СЛОЖНОМУ**

ЛЕКЦИЮ ЧИТАЕТ
СЕРГЕЙ ДЕМИН
КАНДИДАТ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК,
СТИПЕНДИАТ ПРЕЗИДЕНТА РФ, А ТАКЖЕ ГЛАВЫ
АДМИНИСТРАЦИИ Г. КАЗАНИ, ПОБЕДИТЕЛЬ
КОНКУРСА НА ЛУЧШУЮ РАБОТУ В ОБЛАСТИ
МЕДИЦИНСКОЙ ФИЗИКИ

19
ЯНВАРЯ
в 17:00*

*HQ: Institute_of_physics_kfu Институт физики КФУ UNIVER.TV

Студенческая наука:

1. Участие наших студентов в значимых всероссийских и международных конференциях: Международная научно-практическая конференция аспирантов, магистрантов и студентов «**Физика конденсированного состояния**» (ГрГУ им. **Янки Купалы, Гродно**), Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «**Ломоносов**» (МГУ, Москва); **Академические чтения по космонавтике**, посвященные памяти академика С.П. Королёва и других выдающихся отечественных ученых - пионеров освоения космического пространства Москва (МГТУ, Москва); Всероссийская научная молодежная школа-конференция «**Химия, физика, биология: пути интеграции**» (ФИЦ ХФ РАН, Москва), Международная конференция «**Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии**» (УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск), Международная конференция и молодёжная школа «**Информационные технологии и нанотехнологии**» (Самарский университет, Самара) и др. Отдельные доклады были признаны лучшими в своих секциях!
2. Студенты – авторы статей в ведущих российских и зарубежных изданиях.
3. Студенты – активные участники итоговой научно-образовательной конференции студентов КФУ.
4. Совместно с сотрудниками кафедры студенты участвуют в проведении исследований в рамках российских и региональных конкурсов и грантов.

Дополнительные аспекты:

- Активное проведение научно-методического семинара на кафедре

ОБЪЯВЛЕНИЕ

В четверг, 5 мая, в 15.40, на кафедре вычислительной физики (каб. 503) Института физики КФУ состоится научный семинар.

Тема доклада:
«Моделирование для начинающих: LAMMPS»



На семинаре будет обсуждаться использование вычислительного пакета LAMMPS, а также его структура и существующие возможности. Будут рассматриваться примеры использования в нескольких ситуациях: от простого моделирования жидкости до переходных процессов, таких, как образование трещин.

Докладчик:
Цыганков Артем Алексеевич, аспирант 1 г.о.

ОБЪЯВЛЕНИЕ

В четверг, 21 апреля, в 15.30, на кафедре вычислительной физики Института физики КФУ состоится научный семинар. Семинар будет проходить в дистанционной форме через платформу MS Teams.

Тема доклада:
«Пористые структуры на основе TINI – получение, исследование, оптимизация, применение»



Докладчик:
Ашкоев Сергей Геннадьевич

кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории «Медицинских сплавов и имплантатов с памятью формы» Сибирского физико-технического института, Томский государственный университет.

В четверг, 17 февраля, в 15.40, на кафедре вычислительной физики Института физики КФУ состоится научный семинар. Семинар будет проходить в дистанционной форме через Microsoft Teams.

Ссылка на собрание будет опубликована перед началом доклада на странице группы ВКонтакте (vk.com/comp_phys_kpfu)




Тема доклада:
«Гибридные потенциалы в моделировании»



Докладчик:
Цыганков Артем Алексеевич, аспирант 1 г.о.

Института физики КФУ (каб. 503) состоится научный семинар

Тема доклада: «О возможности однозначного определения потенциалов межатомного взаимодействия по структурным данным методами машинного обучения»



Докладчик:
Хабибуллин Роман Альбертович, магистрант 2 г.о.

Тема доклада: «Электронные и теплотехнические свойства газовых гидратов: результаты моделирования из первых принципов»



Докладчик:
Юсупов Мухаммадбек Бекузайевич, магистрант 2 г.о.

Дополнительные аспекты:

- Просветительские ролики о наших студентах-выпускниках

НАШИ ВЫПУСКНИКИ

Тележников
Никита
Вадимович

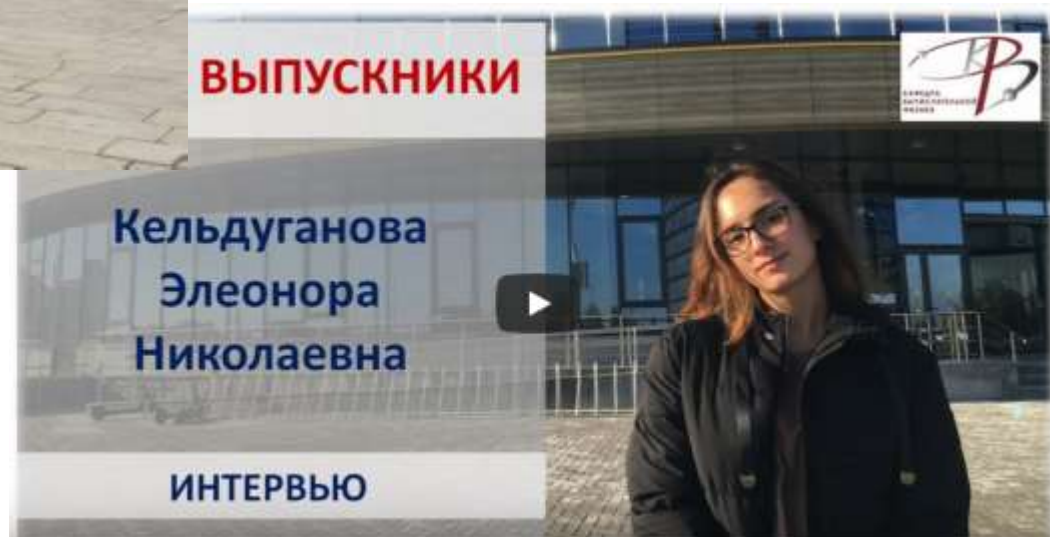
ИНТЕРВЬЮ



ВЫПУСКНИКИ

Кельдуганова
Элеонора
Николаевна

ИНТЕРВЬЮ



Дополнительные аспекты:

- Успешные защиты ВКР и магистерских диссертаций студентами кафедры!





Спасибо за внимание!

Отчет подготовил: к.ф.-м.н., доц. С.А. Демин