

15 апреля

**222 аудитория
главный корпус
СФТИ ТГУ**

в 15.00

Научный семинар

Теория моделирования материалов: от технологических приложений до описания свойств земного ядра

Докладчик: **Игорь Анатольевич Абрикосов**, профессор кафедры теоретической физики, Институт физики, химии и биологии (IFM), Линчёпингский университет, Швеция

В данном докладе проводится обзор неэмпирической теории электронной структуры и ее применения для исследования широкого спектра материалов. Будут представлены основные идеи, лежащие в основе современных методов первопринципного моделирования фазовой стабильности, термодинамических и механических свойств интерметаллических соединений и сплавов. Мы сконцентрируемся на методах, которые обеспечивают эффективное описание химического [1] и теплового [2] разупорядочения, и проиллюстрируем их предсказательные возможности для систем, применяемых в современной энергетике: Fe-Cr сталей [3,4] и Zr. Возможности применения методов теоретической физики в междисциплинарных исследованиях будут проиллюстрированы на примере изучения свойств земного ядра [5].

[1] A.V. Ruban and I.A. Abrikosov, Rep. Prog. Phys. 71, 046501 (2008).

[2] O. Hellman, I.A. Abrikosov, and S.I. Simak, Phys. Rev. B 84, 180301(R) (2011);

O. Hellman, P. Steneteg, I.A. Abrikosov, and S.I. Simak, Phys. Rev. B 87, 104111 (2013).

[3] P. Olsson, I.A. Abrikosov, L. Vitos, and J. Wallenius, J. Nucl. Mat. 321, 84 (2003); P. Olsson, I.A. Abrikosov, and J. Wallenius, Phys. Rev. B 73, 104416 (2006).

[4] A.V. Ponomareva, A.V. Ruban, O.Yu. Vekilova, S.I. Simak, and I.A. Abrikosov, Phys. Rev. B 84, 094422 (2011).

[5] L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia, O. Narygina, A. Kuznetsov, V. Prakapenka, L. Vitos, B. Johansson, A.S. Mikhaylushkin, S.I. Simak, and I.A. Abrikosov, Science 316, 1880 (2007); K. Glazyrin, L.V. Pourovskii, L. Dubrovinsky, O. Narygina, C. McCammon, B. Hewener, V. Schünemann, J. Wolny, K. Muffler, A.I. Chumakov, W. Crichton, M. Hanfland, V. Prakapenka, F. Tasnádi, M. Ekholm, M. Aichhorn, V. Vildosola, A.V. Ruban, M.I. Katsnelson, I.A. Abrikosov, Phys. Rev. Lett. 110, 117206 (2013); L.V. Pourovskii, T. Miyake, S.I. Simak, A.V. Ruban, L. Dubrovinsky, and I.A. Abrikosov, Phys. Rev. B 87, 115130 (2013).