

Это направление исследований возглавляет проф. И.А. Абрикосов.

Эта страница:

- [О лаборатории](#)
- [Научное сотрудничество](#)
- [Некоторые публикации](#)

О лаборатории

Междисциплинарная лаборатория Моделирования и разработки новых материалов НИТУ «МИСиС» создана в мае 2014 г.

Научное руководство лабораторией осуществляет профессор Игорь Анатольевич Абрикосов, выпускник МИСиС, более 20 лет работающий в Швеции. Работа лаборатории финансируется «мегагрантом», учрежденным правительством России и выигранным проф. Абрикосовым совместно с НИТУ «МИСиС».

Основная цель коллектива лаборатории – разработка вычислительных инструментов нового поколения на наиболее фундаментальном уровне квантовой физики, обладающих предсказательной силой, достаточной для научно-обоснованного дизайна материалов. С помощью наиболее современных методов компьютерного моделирования коллектив лаборатории будет изучать физические явления с большим стратегическим потенциалом для современных технологий и технологий будущего. Также будет организована экспериментальная проверка теоретических предсказаний.

Конкретная задача лаборатории – значительно сократить время, требуемое для открытия перспективных материалов, и доказать их практическую ценность для коммерческого рынка.

Долгосрочная задача лаборатории – поменять эмпирическую парадигму разработки материалов, господствующую в человеческой истории несколько тысяч лет, и дать материаловедению третьего тысячелетия по-настоящему мощный инструмент для ускоренного дизайна материалов.

Научное сотрудничество

Лаборатория моделирования и разработки новых материалов сотрудничает со следующими научными организациями:

- Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия.
- Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия.
- Линчёпингский Университет, Линчопинг, Швеция.
- Уппсальский Университет, Упсала, Швеция.
- Институт исследований железа общества Макса Планка, Дюссельдорф, Германия.
- Политехническая Школа, Париж, Франция.

По вопросам сотрудничества обращайтесь по электронной почте mmdl.misis@gmail.com

Некоторые публикации

1. Ponomareva, A. V., Gornostyrev, Y. N. & Abrikosov, I. A. Ab initio calculation of the solution enthalpies of substitutional and interstitial impurities in paramagnetic fcc Fe. // Phys. Rev. B 90, 014439 (2014).
2. Pourovskii, L. V., Mravlje, J., Ferrero, M., Parcollet, O. & Abrikosov, I. A. Impact of electronic correlations on the equation of state and transport in ϵ -Fe. // Phys. Rev. B 90, 155120 (2014).
3. Tal, A. A. et al. Molecular dynamics simulation of the growth of Cu nanoclusters from Cu ions in a plasma. // Phys. Rev. B 90, 165421 (2014).
4. Ivady, V., Simon, T., Maze, J. R., Abrikosov, I. A. & Gali, A. Pressure and temperature dependence of the zero-field splitting in the ground state of NV centers in diamond: A first-principles study. // Phys. Rev. B 90, 235205 (2014).
5. Lin H., Pilemalm R., Rogstrom L., Tasnadi F., Ghafoor N., Forsen R., Johnson L. J. S., Johansson-Joesaar M. P., Oden M. , and Abrikosov I. A. High temperature phase decomposition in $Ti_xZr_yAl_zN$. // AIP Adv. 4, 127147 (2014).
6. Abrikosov, I. A. et al. Theoretical description of pressure-induced phase transitions: a case study of Ti–V alloys. // High Press. Res. 1–7 (2015).
7. Пономарева, А. В., Горностырев, Ю. В. & Абрикосов, И. А. Энергия взаимодействия примесей углерода в парамагнитном γ -железе. // ЖЭТФ 147, готова к публикации (2015).
8. Lugovskoy, A. V., Belov, M. P., Krasilnikov, O. M. & Vekilov, Y. K. Stability of the hcp Ruthenium at high pressures from first principles. // J. Appl. Phys. 116, 103507 (2014).
9. Kuptsov, K. A., Kiryukhantsev-Korneev, P. V., Sheveyko, A. N. & Shtansky, D. V. Structural transformations in TiAlSiCN coatings in the temperature range 900–1600°C. // Acta Mater. 83, 408–418 (2015).
10. Dmitriev, A. I., Ponomareva, A. V., Nikonov, A. Y., Abrikosov, I. A. & Barannikova, S. A. First-principles Modeling of Materials for Nuclear Energy Applications. // AIP Conf. Proc. 1623, 131 (2014).
11. Belov, M. P., Syzdykova, A. B., Vekilov, Y. K. & Abrikosov, I. A. Hydrogen in palladium: Anharmonicity of lattice dynamics from first principles. // Phys. Solid State 57, 260–265 (2015).