Название профиля 01.04.02 - "Теоретическая физика"
1. Уровень (тип) работы:
Диссертационная работа на соискание степени *кандидата физ.-мат. наук*.

2. Тема:
Локальные структурные особенности и микроскопическая коллективная динамика аморфных металлических сплавов

3. Цель работы:
Проект направлен на решение фундаментальной научной проблемы, связанной с изучением явления структурного перехода в металлических сплавах, а также исследование микроскопических коллективных и транспортных процессов в равновесных и переохлажденных расплавах. Предполагается всесторонние исследования, основанные на оригинальных результатах и разработках. Численные данные будут получены на основе крупномасштабного классического компьютерного моделирования атомарной/молекулярной динамики. Результаты моделирования позволят выявить механизмы протекания структурных переходов, микроскопических релаксационных процессов, выявить природу низкочастотной и высокочастотной вибрационной динамики атомов в сплавах. Теоретическое описание и объяснение предполагается выполнить в рамках формализма функций памяти, метода рекуррентных соотношений Ли, уравнения Фоккера-Планка и оригинального теоретико-функционального подхода. Детали структурного упорядочения в аморфных металлических сплавах будет выполнено в рамках метода стохастических испытаний Монте-Карло. Исследование электронных свойств металлов и сплавов будет выполнено в рамках квантово-механического моделирования атомарной/молекулярной динамики Кара-Парринелло.

4. Краткое представление:
Аморфные сплавы – это материалы с высокой прочностью и коррозионной стойкостью; это и магнитомягкие материалы, обладающие гистерезисными магнитными свойствами, уровень которых характерен для лучших кристаллических магнито-мягких материалов (пермаллой, сендаст); это и материалы с инварными свойствами; это и материалы с особыми упругими (элинварными) и магнитомеханическими свойствами (материалы с высоким коэффициентом магнитомеханической связи и пьезомагнитным коэффициентом); это и материалы с особыми электрическими свойствами. Аморфные металлы широко проникают во многие области науки и проявили себя как новые перспективные материалы с самыми разнообразными возможностями для практического использования.

5. Основные установки и программное обеспечение (экспериментальная часть):
Численные расчеты по классическому и квантовомеханическому моделированию атомарной/молекулярной динамике будут выполнено на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного центра Российской Академии Наук. Описание структурных особенностей металлических сплавов будет выполнено с помощью метода Паде-аппроксимант и кластерного анализа, базирующегося на подходе Стейнхарда-Нельсона. Теоретическое описание микроскопической коллективной динамики и транспортных процессов предполагается выполнить в рамках формализма функций памяти, метода рекуррентных соотношений Ли, уравнения Фоккера-Планка и оригинального теоретико-функционального подхода.

6. Результаты:
Подготовка публикаций и докладов на конференции по полученным результатам. Оформление и защита кандидатской работы.

7. Желаемые знания и навыки, образование:
Знание основ языка программирования MatLab, Mathematica. Программирование на языке C/C++.

8. Требуемое время:
4 года

9. Руководитель работы:
Хуснутдинов Рамиль Миннегаязович, доцент, индекс Хирша=8

10. Контактный телефон и адрес электронной почты:
http://kpfu.ru/ramil.husnutdinov
раб.: +7(943)233-77-37
сот.: +7(937)286-27-85
Email: khrm@mail.ru