

**Структура научного профиля (портфолио) потенциального научного руководителя участников Международной олимпиады Ассоциации «Глобальные университеты» по треку аспирантуры**

Университет	<i>НИТУ МИСИС</i>
Уровень владения английским языком	<i>C2</i>
Направление подготовки и профиль образовательной программы, на которую будет приниматься аспирант	<i>Физико-технические науки</i>
Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>Многомасштабное моделирование функциональных покрытий с применением атомистических методов и методов машинного обучения;</i></li> <li>- <i>Изучение магнитных и электронных свойств квазидвумерных магнетиков;</i></li> <li>- <i>Спиновая жидкость;</i></li> <li>- <i>Фундаментальные аспекты математических моделей физики – от модели Хаббарда до модели Гейзенберга.</i></li> </ul>
Перечень предлагаемых соискателям тем для исследовательской работы	<ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>Дефекты в квазидвумерных магнетиках и их влияние на электронные и магнитные свойства;</i></li> <li>- <i>Изучение магнитных и транспортных свойств гетероструктур полупроводник/двумерный магнетик;</i></li> <li>- <i>Спектры магнитных возбуждений в низкоразмерных магнетиках;</i></li> <li>- <i>Моделирование тонких пленок в рамках многомасштабных методов;</i></li> <li>- <i>Изучение защитных функциональных покрытий методами многомасштабного моделирования;</i></li> <li>- <i>Разработка межатомного потенциала - от первопринципного описания к макроскопическим моделям.</i></li> </ul>
	<p style="text-align: center;"><b>Физика конденсированного состояния</b></p> <p>Научные интересы</p> <p><i>Твердотельная физика, электронная теория твердых тел, научное программирование, динамика решетки, теория функционала плотности, много частичная теория, сильно коррелированные системы, Модель Хаббарда, ультрахолодные атомы, низкоразмерный магнетизм, точные стационарные и нестационарные методы, численное решение модельных гамильтонианов, двумерные материалы, Ван-дер-Ваальсовы кристаллы, магнетизм в двумерных системах, машинное обучение</i></p>

<p>Научный руководитель: Карцев Алексей Иванович, PhD по теоретической физики (Lund University, Sweden)</p>	<p>Особенности исследования (при наличии)</p> <p><i>Научная группа имеет широкий опыт в области научного программирования с использованием различных математических методов и методов обработки больших объемов данных, а также обладает большим объемом знаний в области квантовых вычислениях для материаловедения с помощью программных пакетов, основанных на теории функционала плотности, таких как VASP и Quantum Espresso. Руководитель и участники проекта владеют всеми необходимыми теоретическими и расчетными инструментариями для проведения данных исследований. Исследования будут проводиться в тесном контакте с сотрудниками лаборатории компьютерного дизайна материалов МФТИ, лаборатории атомистического моделирования Университета Квинс в Белфасте (Великобритания), Эденбургского Университета (Великобритания) и Стенфордского Университета (США), что позволит получить доступ к дополнительным вычислительным ресурсам на современных вычислительных кластерах мирового уровня. Также стоит отметить, что все участники научной группы активно сотрудничают с ведущими международными лабораториями, а уровень публикаций участников группы соответствует мировому. Все это, слившись воедино с уникальным опытом и знаниями в области реальных материалов, даёт огромный задел и большие возможности для применения их в развитии передовых технологий на основе физики твердого тела в рамках данного проекта. Вычислительная часть проекта будет выполняться в сотрудничестве с JSCC RAS (суперкомпьютерный центр Российской академии наук) на кластере MVS-15000BM с использованием программной среды MPICH.</i></p> <p><i>Группа уже участвует в выполнении крупного проекта по заказу Министерства науки и высшего образования РФ. Таким образом, исследователи, участвующие в данном проекте, уже имеют слаженный коллектив и обладают более чем достаточными знаниями в теории конденсированного состояния, кристаллографии, программировании, численных методах математической физики, использовании операционных систем Linux. Члены коллектива имеют большой опыт в адаптации пакетов квантово-механических вычислений для суперкомпьютерных вычислительных систем с целью компьютерного моделирования атомной и электронной структуры наноматериалов, большой опыт в вычислении атомных, электронных структур, механических и энергетических характеристик наноматериалов, опыт в исследовании физико-химических свойств наночастиц металлов и их оксидов, что подтверждается большим количеством публикаций и поддержанными ранее проектами.</i></p>
---	---

Требования потенциального научного руководителя

*Специализация в области физики конденсированного состояния и физики твердого тела;*

*Знание основ квантовой механики;*

*Опыт работы с численными методами;*

*Опыт выполнения первопринципных расчетов;*

*Знание основ UNIX-систем; Python; Bash; Fortran; C++.*

Основные публикации потенциального научного руководителя за последние 5 лет

*Web of Science 27, Scopus 28, RSCI 34*

1. Vasilyev, D., Ikhshanov, R.S., Zheleznyi, M. and **Kartsev, A.**, 2025. Calculations of elastic and thermal properties of the strengthening C14 Fe6Nb4Al2 Laves phase using the density functional theory. *Journal of Materials Science*, pp.1-15.
2. Chowde Gowda, C., **Kartsev, A.**, Tiwari, N., Sarkar, S., Alexander, S. A., Chaudhary, V., & Tiwary, C. S. (2024). *Harvesting Magneto-Acoustic Waves Using Magnetic 2D Chromium Telluride (CrTe3)*. *Small*, 2405197.
3. Zhou, D., Semenok, D. V., Xie, H., Huang, X., Duan, D., Aperis, A., Oppeneer P. M., Michele Galasso M, **Kartsev A.** ... & Cui, T. (2020). *High-pressure synthesis of magnetic neodymium polyhydrides*. *Journal of the American Chemical Society*, 142(6), 2803-2811.
4. **Kartsev, A.**, Augustin, M., Evans, R. F., Novoselov, K. S., & Santos, E. J. (2020). *Biquadratic exchange interactions in two-dimensional magnets*. *npj Computational Materials*, 6(1), 150.
5. Cesar, D., Acharya, A., Cryan, J. P., **Kartsev, A.**, Kling, M. F., Lindenberg, A. M., ... & Marinelli, A. (2022). *Ultrafast quantum dynamics driven by the strong space-charge field of a relativistic electron beam*. *Optica*, 10(1), 1-10.+
6. Kushchuk LI, **Kartsev AI**. TMN (TM= V, Cr, Mn, Fe, Co) monolayers—a new class of non-van der Waals 2D magnets. *Nanoscale*. 2025;17(16):10292-302.
7. Gowda CC, **Kartsev A**, Tiwari N, Safronov AA, Pandey P, Roy AK, Ajayan PM, Galvão DS, Tiwary CS. Non-thermal magnetic deicing using two-dimensional chromium telluride. *Journal of Materials Chemistry C*. 2024;12(46):18691-703.
8. Kobernik TN, **Kartsev AI**. Gas Adsorption on the Co2Te3 Monolayer: Density Functional Theory Study. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2024 Nov 29;15(49):12151-5.
9. Andrade X, Pemmaraju CD, **Kartsev A**, Xiao J, Lindenberg A, Rajpurohit S, Tan LZ, Ogitsu T, Correa AA. Inq, a modern GPU-accelerated computational framework for (time-dependent) density functional theory. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2021 Nov 2;17(12):7447-67.

	<p>10. Lega P, <b>Kartsev A</b>, Nedospasov I, Lv S, Lv X, Tabachkova N, Irzhak A, Orlov A, Koledov V. Blocking of the martensitic transition at the nanoscale in a Ti<sub>2</sub>NiCu wedge. Physical Review B. 2020 Jun 1;101(21):214111.</p>
	<p>Результаты интеллектуальной деятельности (<i>при наличии</i>)  Государственная регистрация программы для эвм. Номер регистрации (свидетельства): 2025661836. Программа расчета структурных состояний и параметров решеток кристаллических материалов методом NEB.</p>