Форма № 5 (Структура научного профиля (портфолио) потенциальных научных руководителей участников Международной олимпиады Ассоциации «Глобальные университеты» по треку аспирантуры в 2020-2021 гг., утверждена протоколом результатов заочного голосования Организационного комитета Международной олимпиады Ассоциации образовательных организаций высшего образования «Глобальные университеты» для абитуриентов магистратуры от 25.06.2020 г. № 1-з)

|  |  |
| --- | --- |
| Университет | Томский государственный университет/ Kyungpook National University, Республика Корея |
| Уровень владения английским языком | Свободный |
| Направление подготовки, на которое будет приниматься аспирант | Физика и астрономия |
| Код направления подготовки, на которое будет приниматься аспирант | 03.06.01 |
| Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство) | 2014-2016: Руководитель гранта РНФ 14-13-00139 2017-2019: Руководитель гранта 2017040381 Национального научного фонда Республики Корея2020-по н.вр.: основной исполнитель совместного Российско-Корейского гранта NRF-2019K2A9A1A06100125 |
| Перечень возможных тем для исследования | Квантовые материалы, материалы для спиновых приложений |
|  Paul/Documents/DocumentPhotos/PVA_02_08_2013_v2.jpgResearch supervisor:Раvеl V. Аvrаmоv,Doctor Science, Phys&Math, 2011, Emanuel Institute of Biochemistry Physics RAS, Moscow | Футуристические гибридные квантовые материалы: экстремальные локальные поля для снятия спинового вырождения в квантовых ансамблях спиновых кубитов, квантовых точек и антиточек |
| Supervisor’s research interests:Теоретическая химия, квантовая химия, рентгеновская и электронная спектроскопия, электронная структура высокотемпературных сверхпроводников, электронная структура элементарных углеродных и кремний/диоксид кремния нанокластеров, динамика атомной основы углеродных нанокластеров и их производных, структура и свойства кластеров кремния и углерода, наноматериалы для приложений спинтроники и спин-калоритроники, механические свойства углеродных нанокластеров.  |
| Research highlights (при наличии):Предложены футуристические гибридные квантовые материалы с несколькими вертикально собранными расширенными квантовыми ансамблями. Снятие спинового вырождения достигается за счет электрических полей, генерируемых вблизи нанопор, легированных металлическими противоионами. Предложение основано на неопубликованных результатах. |
| Supervisor’s specific requirements: Степень магистра теоретической или квантовой химии, физики твердого тела. Современные методы расчета электронной структуры, DFT, CAS SCF, VASP, GAUSSIAN, GAMESS, CRYSTALL.  |
| Supervisor’s main publications: 32. A. Kuklin, M. Visotin, W. Baek, P. Avramov, CrI3 Magnetic Nanotubes: A Comparative DFT and DFT+U study, and strain effect, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 123, p. 114205 (2020). https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.11420531. V. Pomogaev, S. Chiodo, K. Ruud, R. Kuznetsova, P. Avramov, Computational Investigation on Photophysical Properties of Halogenated Tetraphenyl BODIPY, The Journal of Physical Chemistry C 124, pp. 11100-11109 (May 2020). https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c0174230. A. Kuklin, H. Ågren and P. V. Avramov, Structural stability of single-layer PdSe2 with pentagonal puckered morphology and its nanotubes, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, pp. 8289-8295 (2020). DOI: 10.1039/d0cp00979b.29. W. Baek, S. A. Gromilov, A. V. Kuklin, E. A. Kovaleva, A. S. Fedorov, A. S. Sukhikh, M. Hanfland, V. A. Pomogaev, I. A. Melchakova, P. V. Avramov, K. V. Yusenko, Bulk modulus of lonsdaleite under high-pressure experimentally confirmed, ESRF Highlights 2019, pp. 24-26 (February 2020). http://www.esrf.eu/files/live/sites/www/files/UsersAndScience/Publications/Highlights/2019/HIGHLIGHTS2019.pdf28. L. V. Begunovich, A. V. Kuklin, M. A. Visotin, A. A. Kuzubov, F. N. Tomilin, A. S. Tarasov, Yu. G. Mikhalev, P. V. Avramov, Triple VTe2/Graphene/VTe2 Heterostructures as Perspective Magnetic Tunnel Junction, Applied Surface Science 510, 145315, (April 30, 2020). https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.145315.27. S. Li, K.V. Larionov, Z.I. Popov, T. Watanabe, K. Amemiya, S. Entani, P.V. Avramov, Y. Sakuraba, H. Naramoto, P.B. Sorokin1, S. Sakai, Graphene/half-metallic Heusler alloy: a novel heterostructure towards high-performance graphene spintronic devices, Advanced Materials 32 (6), 1905734 (Feb 2020); DOI: 10.1002/adma.201905734.26. Iu. Melchakova, E.A. Kovaleva, N.S. Mikhaleva, W. Baek, F.N. Tomilin, S.G. Ovchinnikov, A.A. Kuzubov, P. Avramov, External electric field effect on electronic properties and charge transfer in CoI2/NiI2 spinterface, International Journal of Quantum Chemistry, Volume 120, Issue 3, e26092 (February 2020); https://doi.org/10.1002/qua.2609225. V. Pomogaev, P. Avramov, K. Ruud, Photo-Transformation Trajectories of Nitro-Spiropyran in Hybrid Compounds with [60]Fulleren, The Journal of Physical Chemistry C, 123 (30), pp. 18215-18221 (July 2019); https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b0419724. W. Baek, P.V. Avramov, Y. Kim, Nuclear magnetic resonance and theoretical simulation study on Cs ion co-adsorbed with other alkali cations on illite, Applied Surface Science, 489, pp. 766-775, (September 2019), https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.06.03423. E. Kovaleva, Iu. Melchakova, N. Mikhaleva, F. Tomilin, S. Ovchinnikov, W. Baek, V. Pomogaev, P. Avramov, A. Kuzubov, The Role of Strong Electron Correlations in Determination of Band Structure and Charge Distribution of Transition Metal Dihalide Monolayers, Journal of Physics and Chemistry of solids, 134, pp. 324-332 (November 2019), DOI: https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2019.05.036.22. S. Taskaev, K. Skokov, V. Khovaylo, W. Donner, T. Faske, A. Dudorov, N. Gorkavyi, G. Savosteenko, A. Dyakonov, W. Baek, A. Kuklin, P. Avramov, O. Gutfleisch, Pele's hairs and exotic multiply twinned graphite closed-shell microcrystals in meteoritic dust of Chelyabinsk superbolide, 2019, arXiv:1905.08003 [cond-mat.mtrl-sci]21. R. Yu. Smyslov, F. N. Tomilin, I. Shchugoreva, G. I. Nosova, E. V. Zhukova, L. S. Litvinova, A. V. Yakimansky, I. Kolesnikov, I. G. Abramov, S. G. Ovchinnikov, P. Avramov, Synthesis and photophysical properties of copolyfluorenes for light-emitting applications: Spectroscopic experimental study and theoretical DFT consideration, Polymer 168, 185-198 (April 2019); DOI: https://doi.org/10.1016/j.polymer.2019.02.01520. W. Baek, S. Gromilov, A. Kuklin, E. Kovaleva, A. Fedorov, A. Sukhikh, M. Hanfland V. Pomogaev, I. Melchakova P. Avramov, K. Yusenko, Unique Nanomechanical Properties of Diamond-Lonsdaleite Biphases: Combined Experimental and Theoretical Consideration of Popigai Impact Diamonds, Nano Letters 19, 1570−1576 (March 2019); DOI: http://dx.doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b04421. 19. Y. Yamada, A. V. Kuklin, S. Sato, F. Esaka, N. Sumi, C. Zhang, M. Sasaki, E. Kwon, Y. Kasama, P. V. Avramov, S. Sakai, Electronic structure of Li+@C60: Photoelectron spectroscopy of the Li+@C60[PF6−] salt and STM of the single Li+@C60 molecules on Cu(111), Carbon 133, pp. 23-30 (July 2018), DOI: 10.1016/j.carbon.2018.02.106. 18. S. Sakai, S. V. Erohin, Z. I. Popov, S. Haku, T. Watanabe, Y. Yamada, S. Entani, S. Li, P. V. Avramov, H. Naramoto, K. Ando, P. B. Sorokin, Y. Yamauchi, Dirac Cone Spin Polarization of Graphene by Magnetic Insulator Proximity Effect Probed with Outermost Surface Spin Spectroscopy, Advanced Functional Materials 28, p. 1800462 (2018), DOI: 10.1002/adfm.201800462.17. V.A. Pomogaev, V.A. Barachevsky, A.R. Tuktarov, P.V. Avramov, V.Ya. Artyukhov, Inheritance of Photochromic Properties of Nitro Substituted and Halogenated Spiropyrans Containing the Pyrrolidino[60]fullerene, J. Phys. Chem. A 122, pp. 505-515 (January 2018), DOI: 10.1021/acs.jpca.7b0837416. A.G. Kvashnin, P.V. Avramov, D.G. Kvashnin, L.A. Chernozatonskii, Pavel Sorokin, The Features of Electronic, Mechanical and Electromechanical Properties of Fluorinated Diamond Films of Nanometer Thickness, J. Phys. Chem. C 121, pp. 28484-28489 (December 28, 2017), DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b0794615. E. A. Kovaleva, A. A. Kuzubov, P. V. Avramov, A. S. Kholtobina, A. V. Kuklin, F. N. Tomilin, P. B. Sorokin, A key role of tensile strain and surface termination in formation and properties of La0.7Sr0.3MnO3 composites with carbon nanotubes, Computational Materials Science 139, pp. 125–131 (November 2017). https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.07.02114. A.G. Kvashnin, P.V. Avramov, S. Sakai, Yu.S. Nechaev, P.B. Sorokin, Estimation of graphene surface stability against the adsorption of environmental and technological chemical agents, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 254 (6), 1600702 (June 2017), http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/pssb.201600702/abstract, DOI: 10.1002/pssb.201600702.13. D.G. Kvashnin, O.P. Kvashnina, P.V. Avramov, P.B. Sorokin, A.G. Kvashnin, Novel hybrid C/BN two-dimensional heterostructures, Nanotechnology 28 (8), p. 085205 (February 2017), DOI: http://dx.doi.org/10.1088/1361-6528/aa55e9.12. M. Ohtomo, Y. Yamauchi, X. Sun, A. A. Kuzubov, N. S. Mikhaleva, P. V. Avramov, S. Entani, Y. Matsumoto, H. Naramoto, S. Sakai, Direct observation of site-selective hydrogenation and spin-polarization in hydrogenated hexagonal boron nitride on Ni(111), Nanoscale 9, pp. 2369-2375 (February 2017), DOI: 10.1039/C6NR06308J.11. P. Avramov, A. A. Kuzubov, A. V. Kuklin, H. Lee, E. A. Kovaleva, S. Sakai, S. Entani, H. Naramoto, P. B. Sorokin, Theoretical Investigation of the Interfaces and Mechanisms of Induced Spin Polarization of 1D Narrow Zigzag Graphene- and h-BN Nanoribbons on a SrO-Terminated LSMO(001) Surface, The Journal of Physical Chemistry A 121, pp 680–689 (January 2017), DOI: 10.1021/acs.jpca.6b0969610. A.V. Kuklin, A.A. Kuzubov, E.A. Kovaleva, H. Lee, P.B. Sorokin, S. Sakai, S. Entani, H. Naramoto, P. Avramov, The direct exchange mechanism of induced spin polarization of low-dimensional π-conjugated carbon- and h-BN fragments at LSMO(001) MnO-terminated interfaces, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 440, pp. 23-29 (October 2017), DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.12.0969. A. Kuklin, A. A. Kuzubov, E. Kovaleva, N. S. Mikhaleva, F. Tomilin, H. Lee, P. V. Avramov, Two-Dimensional Hexagonal CrN with Promising Magnetic and Optical Properties: A Theoretical Prediction, Nanoscale 9, pp. 621-630 (January 2017), DOI: 10.1039/C6NR07790K.8. Popov Z. I., Mikhaleva N. S., Visotin M. A., Kuzubov A. A., Entani S., Naramoto H., Sakai S., Sorokin P., Avramov P. V., The electronic Structure and Spin States of 2D graphene/VX2 (X=S,Se) Heterostructures, Physical Chemistry Chemical Physics 18, pp. 33047-33052 (December 2016), DOI: 10.1039/C6CP06732H7. Pomogaev V.A., Avramov P.V., Potential Energy Surfaces of Mechanically Induced Reconstruction and Doping of Carbon sp2 Lattice, Computational Materials Science 125, pp.168-175 (December 2016), DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.08.028.6. S. Sakai, S. Majumdar, Z.I. Popov, P.V. Avramov, S. Entani, Y. Hasegawa, Y. Yamada, H. Huhtinen, H. Naramoto, P.B. Sorokin, Y. Yamauchi, Proximity-Induced Spin Polarization of Graphene in Contact with Half-Metallic Manganite, ACS Nano 10, 7532-7541 (August 2016), DOI: 10.1021/acsnano.6b024245. S. Entani , M. Mizuguchi , H. Watanabe , L.Yu. Antipina , P. Sorokin , P.V. Avramov , H. Naramoto, S. Sakai, Effective fluorination of single-layer graphene by high-energy ion irradiation through LiF overlayer, RSC Adv. 6, pp 68525-68529 (July 2016), DOI: 10.1039/C6RA09631J4. E.A. Kovaleva, A.A. Kuzubov, P.V. Avramov, A.V. Kuklin, N.S. Mikhaleva, P.O. Krasnov, Characterization of LSMO/C60 spinterface by first-principle calculations, Organic Electronics 37, pp. 55-60 (October 2016); http://dx.doi.org/10.1016/j.orgel.2016.06.021.3. Kuzubov A.A., Kovaleva E.A., Avramov P.V., Kholtobina A.S., Mikhaleva N.S., Kuklin A.V., Buckminsterfullerene's movability on the Fe (001) surface, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 410, 41-46 (July 2016).2. Kuzubov A.A., Avramov P.V., Nikolaeva K.M., Mikhaleva N.S., Kovaleva E.A., Kuklin A.V., Fedorov A.S., Study of Interaction between Transition Metal Atoms and Bigraphene Monovacancy by Means of Quantum Chemistry, Computational Materials Science, 112 (Part A), 269–275, (February 2016) DOI:10.1016/j.commatsci.2015.11.002.1. Avramov P.V., Sorokin P.B., Kuzubov A.A., Sakai S., Entani S., Naramoto H., Prospects of Spin Catalysis on Spin-Polarized Graphene Heterostructures, Australian Journal of Chemistry 69, pp. 753-758 (July 2016), DOI: 10.1071/CH15174.  |
|  | Results of intellectual activity (при наличии): Углеродные и кремниевые наноматериалы для наноэлектроники, спиновых и квантовых приложений |