*Тезисы доклада*

**Применение первопринципных расчетов для моделирования**

**физических свойств твердых тел**

*Стрельцов С.В.*

Институт физики металлов им М.Н. Михеева УрО РАН

Бурное развитие вычислительных методов в последние десятилетия привело к тому, что в настоящее время они являются одним из необходимых элементов практически любого физического исследования. При этом применение первопринципных подходов (т.е. таких подходов, использующих только основополагающие физические принципы без привлечения дополнительных эмпирических предположений) позволяет не только разобраться с микроскопической природой экспериментально наблюдаемых явлений в реальных веществах, но и получить ряд дополнительных результатов. Одним из наиболее важных является возможность изучать свойства материалов в условиях, которые недостижимы при использовании даже самых современных экспериментальных установок, например, исследовать физические и химические свойства материалов, составляющих мантию или ядро нашей планеты. Кроме того, современные первопринципные расчеты способны предсказывать существование новых соединений и физических явлений, а также подсказывать пути улучшения функциональных свойств уже существующих материалов. В докладе будут представлены конкретные примеры первопринципного моделирования физических свойств различных веществ [1].

Список литературы:

[1] С.В. Стрельцов и Д.И. Хомский, УФН 187, 1205 (2017)

[2] S.V. Streltsov et al., PNAS 115, 9945 (2018)

[3] A. Revelli et al., Science Advances 5, eaav4020 (2019)

[4] S.V. Streltsov, D.I. Khomskii, PNAS 113, 10491 (2016)

[5] A. J. Hearmon et al., Phys. Rev. Lett. 108, 237201 (2012)

[6] S. Lee et al., Nature Materials 5, 471 (2006)