

НАПРАВЛЕНИЯ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Тема НИР:

Исследование методами компьютерного моделирования электронных, колебательных свойств и реакционной способности полупроводниковых и диэлектрических материалов различного уровня организации и размерности.

Руководитель темы: Журавлев Ю.Н., д.ф.-м.н., профессор.

Исполнители: Альтшулер О.Г., д.х.н., доцент, Кособуцкий А.В., к.ф.-м.н., доцент, Журавлева Л.В., к.ф.-м.н., доцент, Федорова Т.П., к.ф.-м.н., доцент, Алейникова М.В., к.ф.-м.н., Дягилев Д.В., к.ф.-м.н., доцент, Киселева Е.А., аспирант, Порохнов А.Н., инженер, Празян Т.Л., инженер

Разработка методических основ профильной подготовки «Преподавание физики»

Исполнители темы: Гордиенок Н.И., к.х.н., доцент, Кызыласов Ю.И., к.ф.м.н., доцент, Тимошенко С.А., к.ф.м.н., доцент

Сотрудники кафедры ведут научно-исследовательскую работу в области физики конденсированного состояния и физической химии. Объектами исследования являются энергоемкие соединения, углеродные наноматериалы, полупроводниковые гетероструктуры, перспективные в области оптоэлектроники. Основным инструментарием выполнения работ являются методы компьютерного моделирования с использованием современного программного обеспечения, которые позволяют с высокой точностью предсказывать структурные, механические и электронные свойства изучаемых соединений. В работе используются хорошо известные свободные и коммерческие программные пакеты Abinit, Quantum ESPRESSO, CRYSTAL, WIEN2k, SIESTA, реализующие методы теории функционала электронной плотности (ТФП) и Хартри-Фока и оптимизированные для выполнения расчетов на многопроцессорных вычислительных кластерах. Стоит отметить, что в настоящее время именно методы ТФП лежат в основе большинства *ab initio* исследований наноструктур, что обусловлено наиболее выгодным соотношением уровня точности получаемых результатов к затрачиваемым компьютерным ресурсам.

Результаты научных исследований сотрудников кафедры опубликованы в таких журналах как "Физика твердого тела", "Журнал структурной химии", "Физика и техника полупроводников", "Известия вузов. Физика", "Журнал экспериментальной и теоретической физики", "Physica Status Solidi", "Journal of Chemical Physics", "Journal of Physics and Chemistry of Solids", "Journal of Physics: Condensed Matter" и др.

Некоторые факты:

- общее количество научных публикаций в рецензируемых научных журналах за последние пять лет (2010-2015 гг.) составляет 92 (из них 36 статей в зарубежных журналах),
- в сборниках трудов российских и международных конференций за последние пять лет опубликовано 72 тезиса докладов,
- работы по ряду научных направлений поддерживались грантами РФФИ и грантами Губернатора Кемеровской области.

Научные публикации преподавателей кафедры в 2014-2015 гг.:

1. S. Yu. Sarkisov, A. V. Kosobutsky, V. N. Brudnyi, and Yu. N. Zhuravlev. Ab Initio Calculations of Optical Constants of GaSe and InSe Layered Crystals // *Physics of the Solid State*, 2015, V. 57, N. 9, P. 1735–1740. doi: 10.1134/S1063783415090309 (**Impact Factor 0.82**).
2. Gordienko, A. B., & Filippov, S. I. (2015). Calculation of characteristics of the absorbance of fluorides with regard to many-particle effects. *Journal of Structural Chemistry*, 56(4), 601-607. doi:10.1134/S0022476615040010 (**Impact Factor 0.51**)
3. Fedorov, I. A., Rubtsova, E. S., Khaydukova, N. S., & Zhuravlev, Y. N. (2015). Hydrostatic pressure effects on structural and electronic properties of pentacene from first

- principles calculations. Paper presented at the IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 81(1) doi:10.1088/1757-899X/81/1/012120
4. V.N. Brudnyi, S.Yu. Sarkisov, A.V. Kosobutsky Electronic properties of GaSe, InSe, GaS and GaTe layered semiconductors: charge neutrality level and interface barrier heights. SEMICONDUCTOR SCIENCE AND TECHNOLOGY 30(11):115019 · NOVEMBER 2015 **Impact Factor: 2.19** DOI: 10.1088/0268-1242/30/11/115019
 5. D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev Structure and electronic properties of Na₂O₂/NaClO₄(001), K₂O/KClO₃(001) systems // Journal of Structural Chemistry 2015. V. 56. N. 2. P. 203-208. doi:10.1134/S0022476615020018 (**Impact Factor 0.51**)
 6. D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev Structure and electronic properties of MnO₃ (M: Li, Na, K, NH₄) under pressure: DFT-D study // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2015. V. 87. P. 38-47. doi:10.1016/j.jpics.2015.08.002 (**Impact Factor 1.85**)
 7. D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev A First-Principles Investigation of Surface Oxidation of Lithium in the Slab Model // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. 2015. V. 51. N. 3. P. 337-340 doi: 10.1134/S2070205115030144 **impact factor: 0.74**
 8. I.A. Fedorov, F. Marsusi, T.P. Fedorova, Y.N. Zhuravlev. First principles study of the electronic structure and phonon dispersion of naphthalene under pressure // Journal of Physics and Chemistry of Solids 2015. V. 83. P. 24-31. doi: 10.1016/j.jpics.2015.03.018 (**Impact Factor 1.85**)
 9. Yu. N. Zhuravlev and V. M. Lisitsyn A Study of the Reactivity of Silver Azide Based on Calculations of the Band Properties within the Framework of Density Functional Theory // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2014, Vol. 8, No. 2, pp. 117-125. doi: 10.1134/S1990793114020109
 10. I.A. Fedorov, Y.N. Zhuravlev. Hydrostatic pressure effects on structural and electronic properties of TATB from first principles calculations // Chemical Physics 2014. V. 436-437. P. 1-7. doi: 10.1016/j.chemphys.2014.03.013
 11. Prudaev I.A. Generation of terahertz radiation in LED heterostructures with multiple InGaN/GaN quantum wells at two-photon excitation by femtosecond laser pulses / I.A. Prudaev, S.Yu. Sarkisov, O.P. Tolbanov, A.V. Kosobutsky // Russian Physics Journal. 2015. V. 58, N. 2. P. 206-210. (**Impact Factor 0.67**)
 12. Kosobutsky A.V., Basalaev Yu.M. Electronic band structure of LiInSe₂: A first-principles study using the Tran-Blaha density functional and GW approximation // Solid State Communications. 2014. V.199. P.17-21.
 13. S.Yu. Sarkisov, I.A. Prudaev, A.V. Kosobutsky, O.P. Tolbanov, G.E. Dunaevsky. Terahertz Emission from InGaN/GaN Multiple Quantum Well Light-Emitting Diode Heterostructures under Two-Photon Excitation // 39th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz 2014, The University of Arizona, Tucson, AZ, September 14-19, 2014), report No. W5-P14.11. DOI: 10.1109/IRMMW-THz.2014.6956482
 14. Л.П. Абрамова, О.Г. Альтшулер, Н.В. Малышенко, Е.В. Остапова, Л.А. Сапожникова, Г.Ю. Шкуренко, В.Ю. Малышева, А.Н. Попова, Г.Н. Альтшулер. Твердофазные нанореакторы для окисления алкилпиридинов // Химия в интересах устойчивого развития. 2015. №2. С. 151-156.
 15. О. Г. Альтшулер, О. М. Колесников, Т. Ю. Павлова Применение компьютерных экспресс-тестов на семинарских занятиях по физике // Вестник КемГУ. 2015. Т.4. №1(61). С. 92-96.
 16. Шайкомалова Е.С., Журавлев Ю.Н. Исследование структурных фазовых состояний воды // Физическое образование в ВУЗах. 2015. Т. 21. № 1С. С. 42-43
 17. Л.П. Абрамова, О.Г. Альтшулер, Н.В. Малышенко, Е.В. Остапова, Л.А. Сапожникова, Г.Ю. Шкуренко, Г.Н.Альтшулер. Получение физиологически активных соединений окислением индивидуальных компонентов каменноугольной смолы в твердофазных нанореакторах // Вестник КузГТУ. 2014. №4. С. 77-82.

18. Н. Altshuler, O. Altshuler .Nanoreactor Effect in Bifunctional Cation Exchangers Based on Cis-Metacyclophanoctol // Journal of Advances in Chemistry. 2014. V.7. N. 2. P. 1330-1337.
19. Порохнов А.Н., Журавлев Ю.Н. Компьютерное моделирование структурных фрагментов органической массы угля // Вестник Кемеровского государственного университета. 2014. № 4-2 (60). С. 133-137
20. Празян Т.Л., Журавлев Ю.Н., Исследование физико-химических свойств ряда взрывчатых веществ методами компьютерного моделирования // Вестник Кемеровского государственного университета. 2014. № 4-2 (60). С. 137-144
21. Копытов А.В. Фононные спектры композиционных сверхрешеток AlAs/AIP / А.В. Копытов, Е.Н. Малышева, А.В. Кособуцкий // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, №1. – С. 26-28.
22. Копытов А.В., Малышева Е.Н., Кособуцкий А.В., Басалаев Ю.М. Первопринципные расчеты электронных и колебательных спектров сверхрешеток (AlAs)_n(AIP)_n // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - Т.11, №4/2. - С. 605-609.
23. Федорова Т.П., Поплавной А.С. Температурная зависимость колебательных спектров диоксида циркония ZrO₂ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 660-663.
24. Степанов А.Ю., Сотникова Л.В., Владимиров А.А., Ханефт А.В., Просвиркина Е.В., Титов Ф.В., Дягилев Д.В. Формирование и исследование оптических свойств тонких пленок TiO₂-Ag и TiO₂-AgI / Ползуновский вестник, №3. 2014. С. 53-57
25. Кызыласов Ю.И., Бурсов С.Н. Демонстрационный эксперимент по амплитудной модуляции колебаний и волн // Вестник КемГУ - 2014. - № 1(57). - С. 120-126
26. Кызыласов Ю.И. Нелинейная рефракция в стеклах: из истории первых наблюдений // Вестник КемГУ - 2014. - № 1(57). Т. 2. - С. 97-101

Между кафедрами физического факультета КемГУ налажено тесное взаимодействие, что позволяет выполнять взаимно дополняющие друг друга, комплексные экспериментальные и теоретические исследования. В частности, совместно с кафедрами теоретической и экспериментальной физики в 2009-2012 гг. выполнялись работы по проектам "Исследование особенностей колебательного и электронного строения сложных диэлектрических и полупроводниковых кристаллов в зависимости от структуры их подрешеток" (проект № 2.1.1/1230 в рамках АБЦП "Развитие научного потенциала высшей школы 2009-2010 гг.", научный руководитель проф. А. С. Поплавной), "Исследование механических, термических и барических свойств рядов термодинамически лабильных, суперионных соединений и наноструктур на их основе" (З/н №3.2137.2011, н/р проф. А. С. Поплавной), "Гибкие и прозрачные материалы для электроники на основе одностенных углеродных нанотрубок: получение и электрические свойства" (ФЦП ГК № 14.740.11.0261, н/р С.Д. Шандаков). Кроме того, сотрудники кафедры общей физики имеют прочные связи с научными группами Национального исследовательского Томского политехнического университета и Национального исследовательского Томского государственного университета (грант РФФИ № 10-02-00864а); результаты совместной работы отражены в научных публикациях и отчетах по программам.

В 2014 г. Журавлев Ю.Н. руководил научным проектом РФФИ № 14-32-59119 «Исследование электронных, механических и оптических свойств кристаллов InSe и GaSe, легированных изовалентными примесями» с объемом финансирования 350 тыс. руб.

Кафедра осуществляет подготовку специалистов высшей квалификации. За прошедшие 4 года под руководством д.ф.-м.н., профессора Ю.Н. Журавлева успешно защитились 3 аспиранта с присуждением ученой степени кандидата физико-математических наук. Закончившая в 2012 г. аспирантуру М. В. Алейникова защитила диссертацию в 2013 г.

В научной работе принимают участие и студенты старших курсов. В частности, это позволяет учащимся приобрести более глубокие знания по современной физике и

получить полезные навыки работы с современным компьютерным оборудованием и программным обеспечением (ОС Linux, программы Origin, Matlab, Mathcad и др.). Стоит отметить, что в условиях современного рынка труда одним из наиболее важных требований к выпускникам является способность быстро воспринимать новую информацию и самостоятельно решать различные профессиональные задачи, в том числе и те, с которыми работник ранее не сталкивался. Научно-исследовательская работа, как никакой иной вид деятельности, способствует "активации" мышления и развитию интеллектуальных и творческих способностей, и в этом смысле предоставляет наилучшие возможности для развития личности.

Помимо фундаментальных исследований в области физики конденсированных сред, преподаватели и сотрудники кафедры общей физики занимаются научно-методическими исследованиями и разработками в области физического образования и методики преподавания физики в высшей и средней школе. Работа в данном направлении позволила создать необходимую методическую базу для реализации на физическом факультете КемГУ профиля подготовки "Преподавание физики". В настоящее время большое внимание уделяется изучению возможностей интерактивных средств обучения, которые способны существенно повысить эффективность образовательных программ и обеспечить формирование необходимых профессиональных компетенций студентов. Сотрудниками кафедры в 2013-2015 гг. разработаны следующие электронные учебные материалы:

- Задачи по общей физике «Оптика»: учебно-методическое пособие / сост. Ю.И. Польшгалов, Ю.И. Кызыласов, Л.В. Журавлева, В.М. Гзогян; ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет». – Кемерово, 2013. – 163 с.
- Задачи по общей физике «Электричество и магнетизм»: учебно-методическое пособие / сост. Ю.И. Польшгалов; ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет». – Кемерово, 2013. – 81 с.
- И. А. Федоров, Ю.М. Басалаев, Т. П. Федорова. Практическое руководство по применению пакета CRYSTAL к расчету электронного строения кристаллов и молекул / сост., И. А. Федоров; Ю.М. Басалаев; Т. П. Федорова. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет». –Кемерово, 2014. – 43 с.
- Журавлева Л.В. Векторная и растровая графика [Электронный ресурс]: (электронный учебно-методический комплекс) / Л.В.Журавлева. – Кемерово: Изд-во КемГУ, 2014. – 1 электрон. опт. диск (DVD-ROM). объем ЭИ: 788 Мб Сист. требования: Intel Pentium-III (или аналогичный процессор других производителей), 500 МГц; 512 Мб оперативной памяти; видеокарта SVGA, 1280x1024 High Color (32 bit); 1,67 Гб свободного дискового пространства; операц. система Windows XP и выше; ПО: Internet Explorer 7; AdobeFlash Player. – Загл. с экрана. – Номер гос. регистрации в ФГУП НТИЦ «Информрегистр»

Выполнение научно-методических исследований проводится на базе 5 лабораторий кафедры – механики, молекулярной физики, электричества и магнетизма, оптики, методики преподавания физики, а также компьютерного класса, оборудованного программно-технологическим комплексом «Цифровая школа».