

Компьютерный дизайн новых материалов

Артем Р. Оганов (Сколтех и МИСиС, Россия)

Предсказание кристаллических структур

Постановки и решения задачи предсказания структур. Оптимизация физических свойств.

Предсказание стабильных соединений.

Оптимизация физических свойств. Оптимизация по Парето. Менделеевский поиск.

Расшифровка кристаллических структур – одна из главных научных революций



The Nobel Prize in Physics 1914

"for his discovery of the diffraction of X-rays by crystals"



Max von Laue



The Nobel Prize in Physics 1915

"for their services in the analysis of crystal structure by means of X-rays"



Sir William Henry Bragg



William Lawrence Bragg



The Nobel Prize in Chemistry 1985

"for their outstanding achievements in the development of direct methods for the determination of crystal structures"

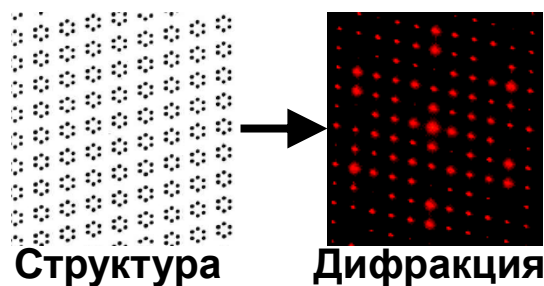


Herbert A. Hauptman



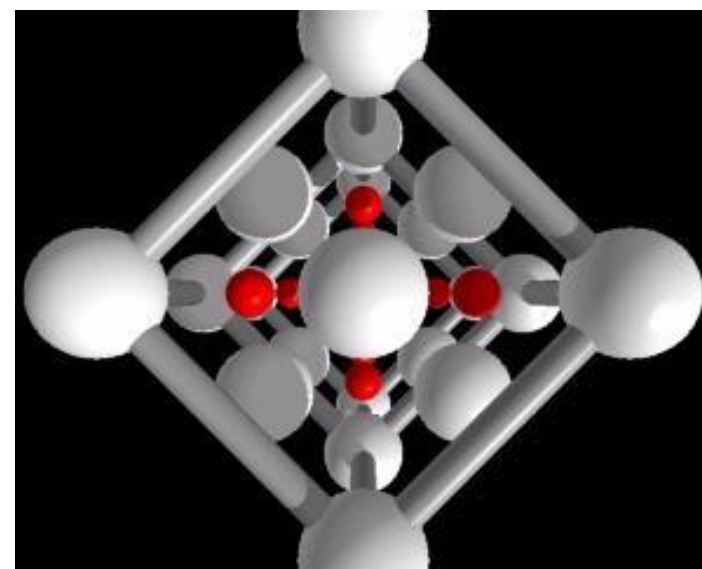
Jerome Karle

(from <http://nobelprize.org>)



Сфалерит ZnS .

Одна из первых структур, расшифрованных в 1913 г.



Зная структуру, можно с хорошей точностью предсказать множество свойств

Теория функционала плотности (W. Kohn, 1964-1965),
Нобелевская премия 1998 г.

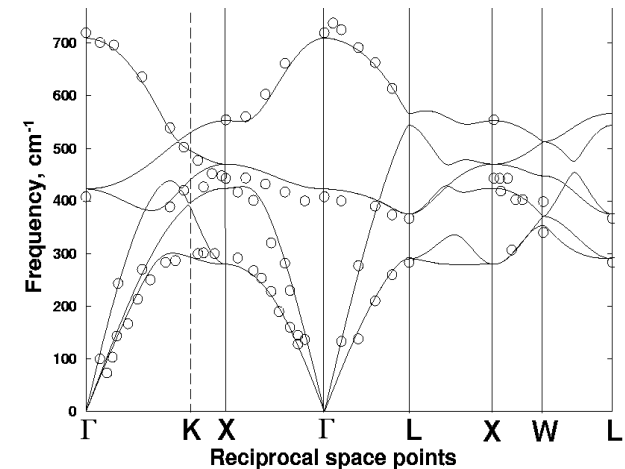


W. Kohn

$$E = E_{n-n}[\rho] + \int V_{n-e} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho] + E_{kin}[\psi \rightarrow \rho]$$

Уравнения состояния и термодинамика фаз
в системе MgO-SiO₂: теория и эксперимент
(Оганов, 2003-2005)

	$V_0, \text{\AA}^3$	K_0, GPa	K_0'
<u>MgO</u>			
Theory	76.2	168.7	4.258
Exp.	74.7	160.2	3.99
<u>Stishovite</u>			
Theory	46.3	318.3	4.373
Exp.	46.9	312.9	4.8
<u>MgSiO₃ perovskite</u>			
Theory	163.3	261.4	4.032
Exp.	162.3	259.5	3.69



Колебания решетки MgO:
теория и эксперимент
(Оганов et al., *J.Chem.Phys.* 2003)

$$F(T) = E_0 + \int_0^{\omega_{max}} \frac{1}{2} \hbar \omega g(\omega) d\omega + k_B T \int_0^{\omega_{max}} \ln[1 - \exp(-\frac{\hbar\omega}{k_B T})] g(\omega) d\omega$$

$$G = F - V(dF/dV)$$

	<u>MgO periclasе</u>		<u>SiO₂ Stishovite</u>		<u>MgSiO₃ perovskite</u>	
	theory	Exp	theory	Exp	theory	Exp
C_V	36.58	36.87	41.3	42.2	80.73	77.3
S	26.81	27.13	24.6	25.9	57.14	57.2

О предсказании кристаллической структуры

Faraday Discussions

Cite this: *Faraday Discuss.*, 2018, 211, 643



PAPER

[View Article Online](#)
[View Journal](#) | [View Issue](#)

Crystal structure prediction: reflections on present status and challenges

Artem R. Oganov  ^{abc}

Received 30th August 2018, Accepted 30th August 2018

Полезные книги и обзоры

Faraday Discussions

Cite this: *Faraday Discuss.*, 2018, 211, 643



REVIEWS

PAPER

[View Article Online](#)
[View Journal](#) | [View Issue](#)

Crystal structure prediction: reflections on present status and challenges

Artem R. Oganov abc

Received 30th August 2018, Accepted 30th August 2018

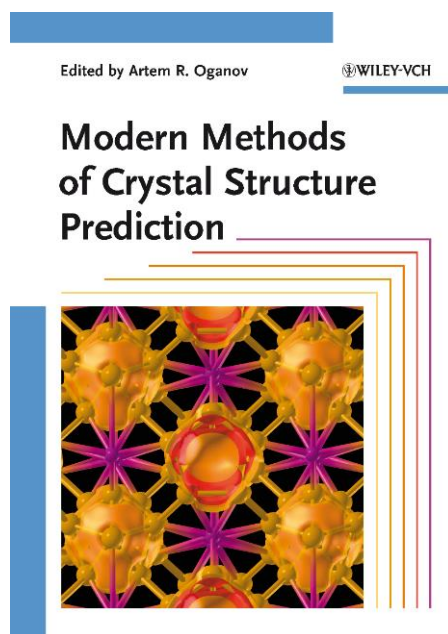
Structure prediction drives materials discovery

Artem R. Oganov^{1,2,5*}, Chris J. Pickard^{4,5*}, Qiang Zhu⁶ and Richard J. Needs⁷

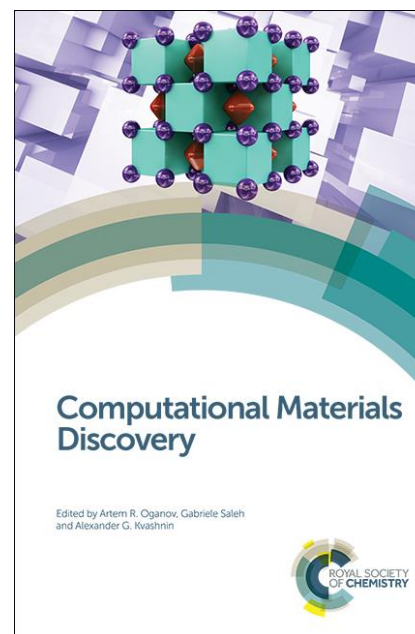
Abstract | Progress in the discovery of new materials has been accelerated by the development of reliable quantum-mechanical approaches to crystal structure prediction. The properties of a material depend very sensitively on its structure; therefore, structure prediction is the key to computational materials discovery. Structure prediction was considered to be a formidable problem, but the development of new computational tools has allowed the structures of many new and increasingly complex materials to be anticipated. These widely applicable methods, based on global optimization and relying on little or no empirical knowledge, have been used to study crystalline structures, point defects, surfaces and interfaces. In this Review, we discuss structure prediction methods, examining their potential for the study of different materials systems, and present examples of computationally driven discoveries of new materials — including superhard materials, superconductors and organic materials — that will enable new technologies. Advances in first-principle structure predictions also lead to a better understanding of physical and chemical phenomena in materials.

***Faraday Discussions* (2018)**

***Nature Reviews Materials* (2019)**



2011



2018

Are Crystal Structures Predictable?

ANGELO GAVEZZOTTI*



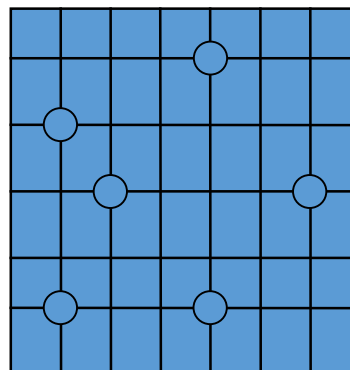
“No”: by just writing down this concise statement, in what would be the first one-word paper in the chemical literature, one could safely summarize the present state of affairs

ONE of the continuing scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from a knowledge of their chemical composition. Who, for example, would guess that graphite, not diamond, is the thermodynamically stable allotrope of carbon at ordinary temperature and pressure? Solids such as crystalline water (ice) are still thought to lie beyond mortals' ken.

J. Maddox
(*Nature*, 1988)

Задача – найти ГЛОБАЛЬНЫЙ минимум энергии. Перебором задачу не решить

$$C = \frac{1}{(V/\delta^3) [(V/\delta^3) - N]! N!} (V/\delta^3)!$$



N _{atoms}	Variants	CPU time
1	1	1 sec.
10	10 ¹¹	10 ³ yrs.
20	10 ²⁵	10 ¹⁷ yrs.
30	10 ³⁹	10 ³¹ yrs.

RESEARCH NEWS

Crystal structure prediction – evolutionary or revolutionary crystallography?

S. L. Chaplot and K. R. Rao

CURRENT SCIENCE, VOL. 91, NO. 11, 10 DECEMBER 2006

Публикация о нашем методе USPEX (Oganov & Glass, *J.Chem.Phys.* 2006)

Кристаллические структуры можно предсказывать!

Проект USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography)

<http://uspex-team.org>

[Oganov A.R., Glass C.W., *J.Chem.Phys.* 124, 244704 (2006)]

- Сочетание эволюционного алгоритма и квантовомеханических расчетов.
- >8500 пользователей.

•Решает «нерешаемую» задачу предсказания структуры вещества

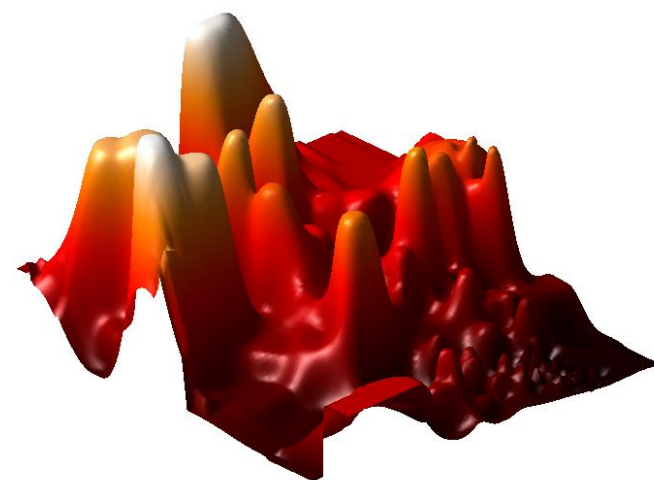
Квантовомеханические расчеты
(теория функционала плотности):



Э. Шрёдингер



У. Кон

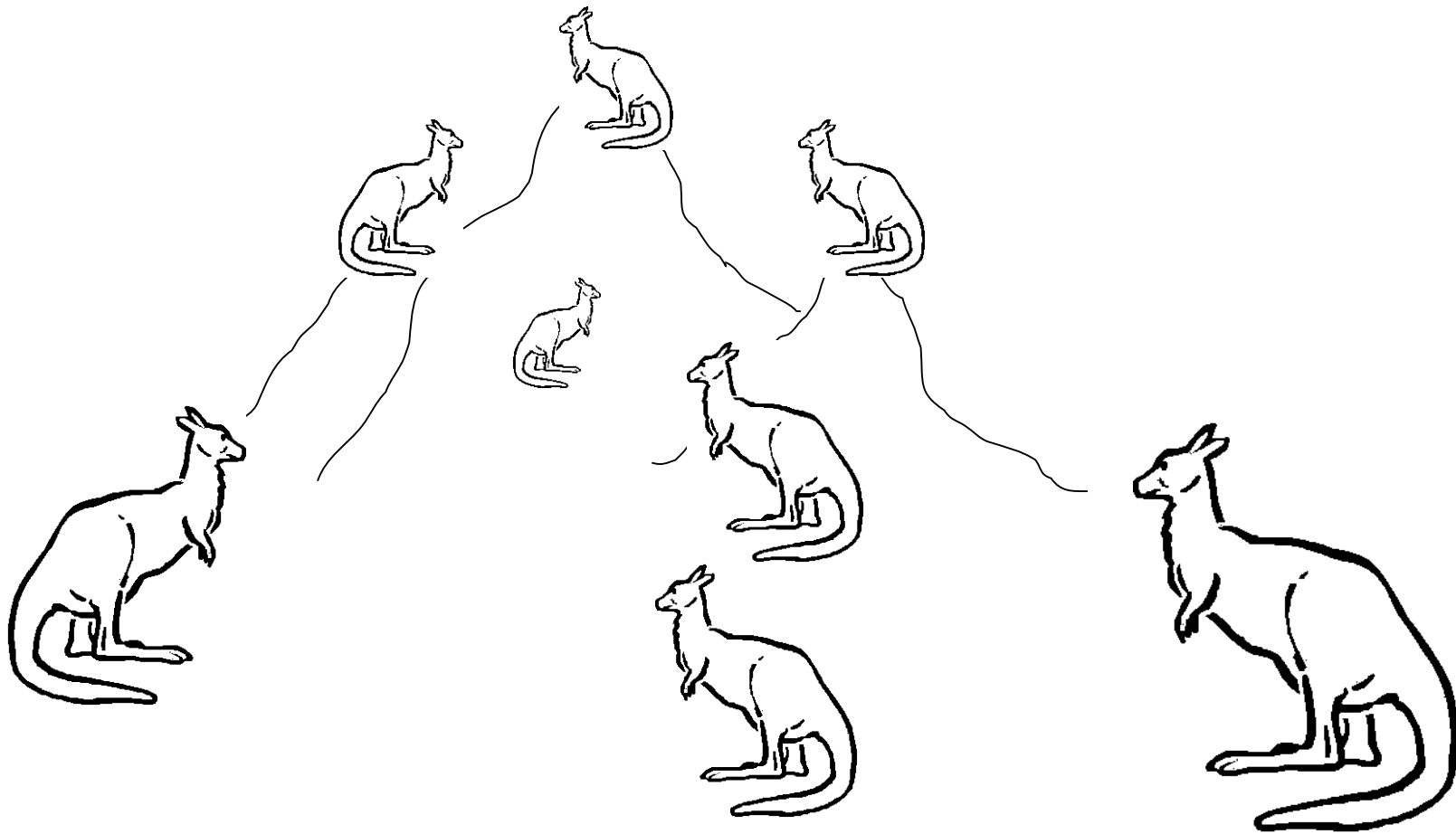


Energy landscape of Au₈Pd₄

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + v_{e-n}[\rho(\mathbf{r})] + v_H[\rho(\mathbf{r})] + v_{xc}[\rho(\mathbf{r})]\right)\phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r})$$

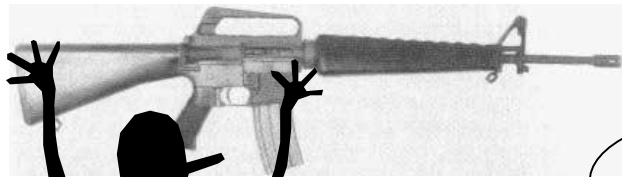
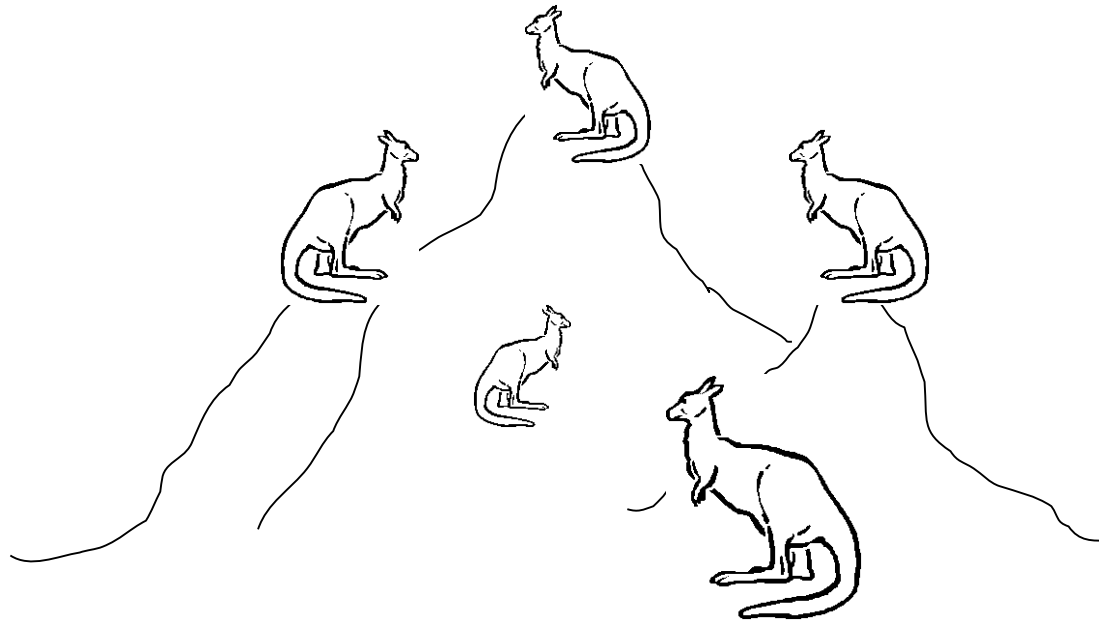
$$E_{GGA,xc} = \int d\mathbf{r} F_{xc}(\rho, \frac{|\nabla\rho|}{2k_f\rho(\mathbf{r})})\rho(\mathbf{r})e_x[\rho(\mathbf{r})]$$

Методы глобальной оптимизации: кенгуру ищет гору Эверест

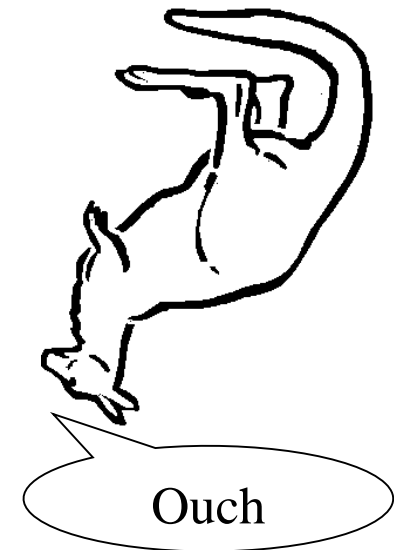


Эволюционные алгоритмы: сбросим десант кенгуру, каждый идет на ближайшую вершину и размножается с соседями (не показано по совету Роспотребнадзора...)

Методы глобальной оптимизации: кенгуру ищет гору Эверест

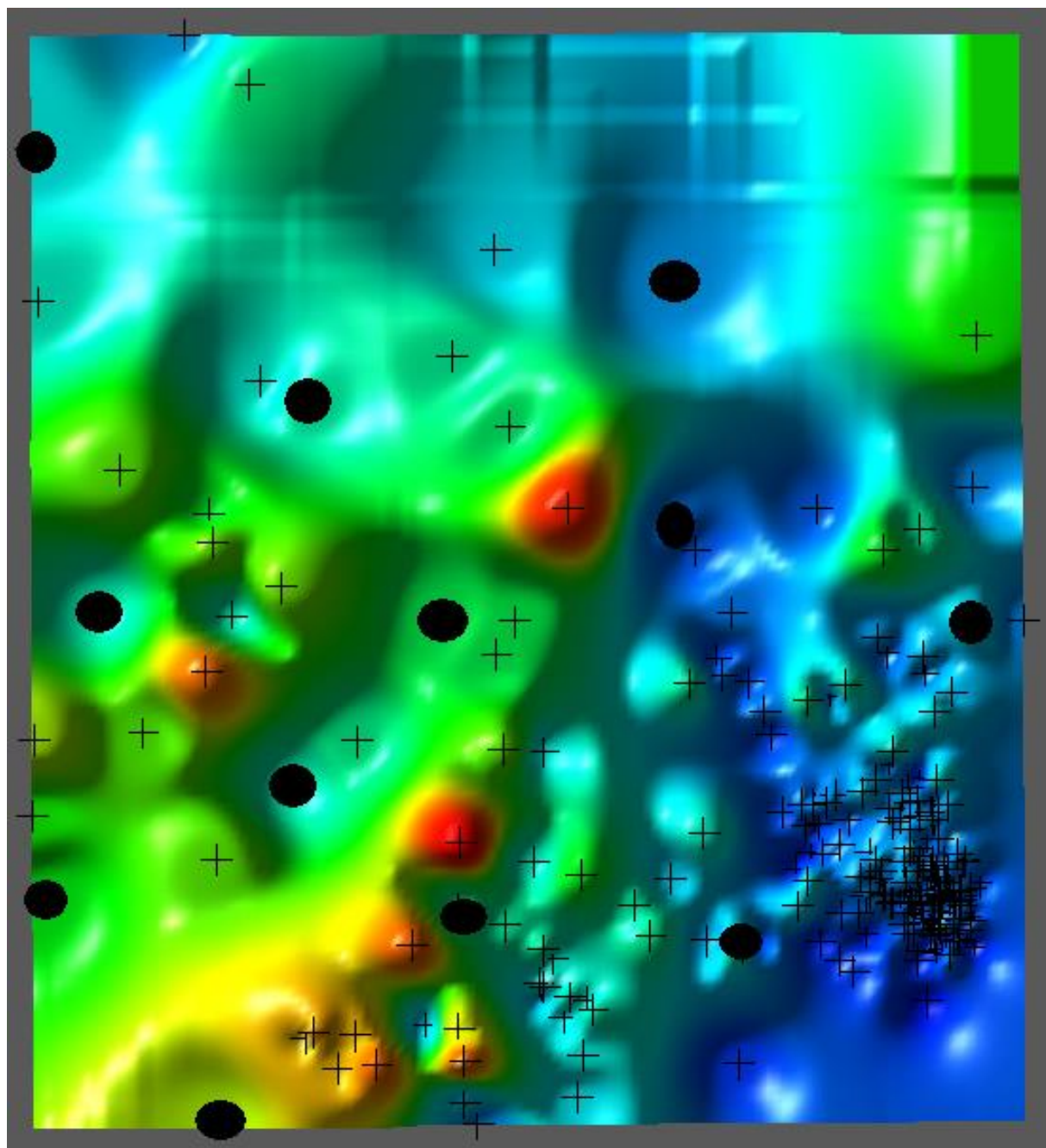


Aaaargh
!

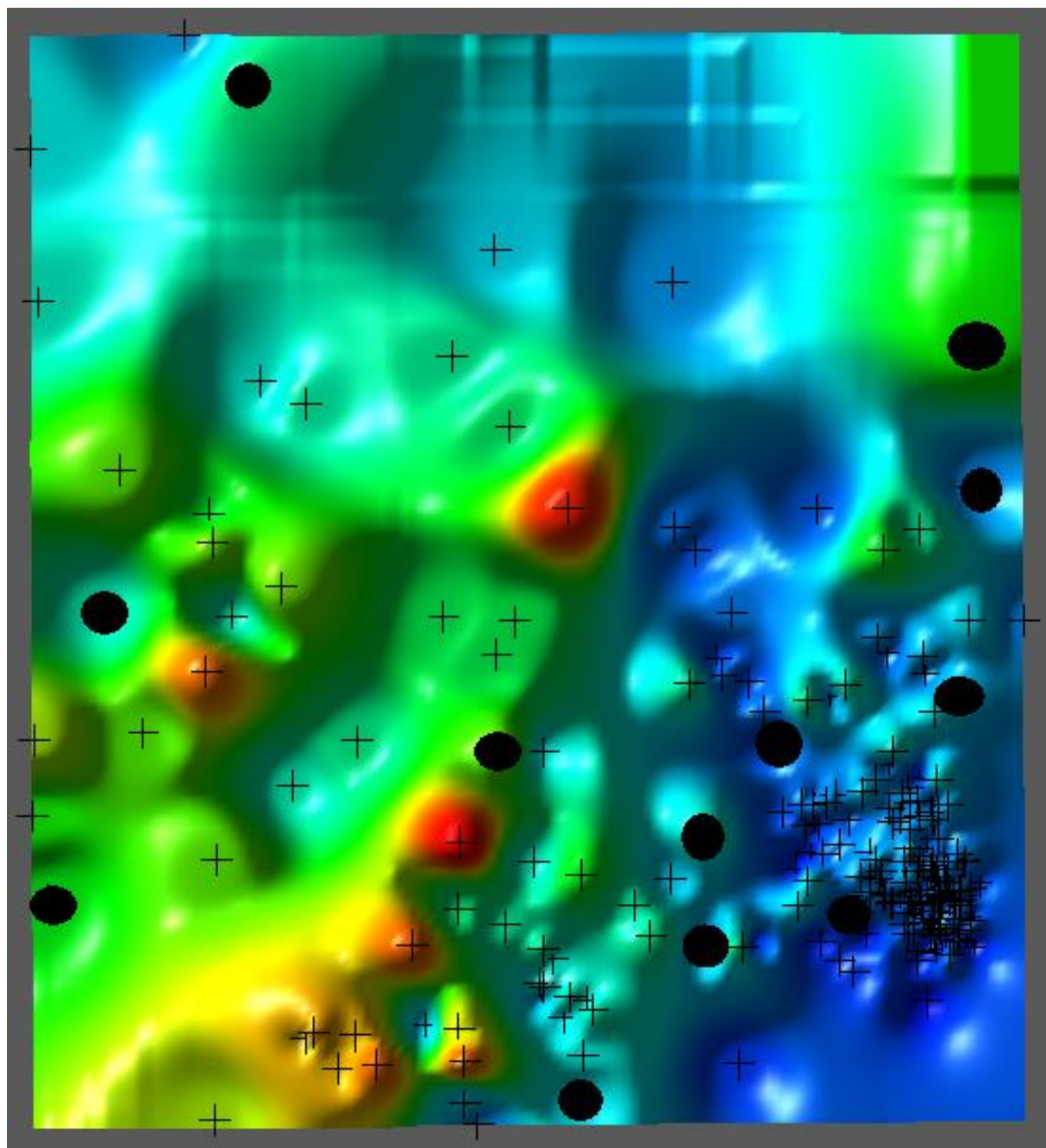


....но время от времени приходят охотники и
отстреливают тех, кто забрался ниже других.

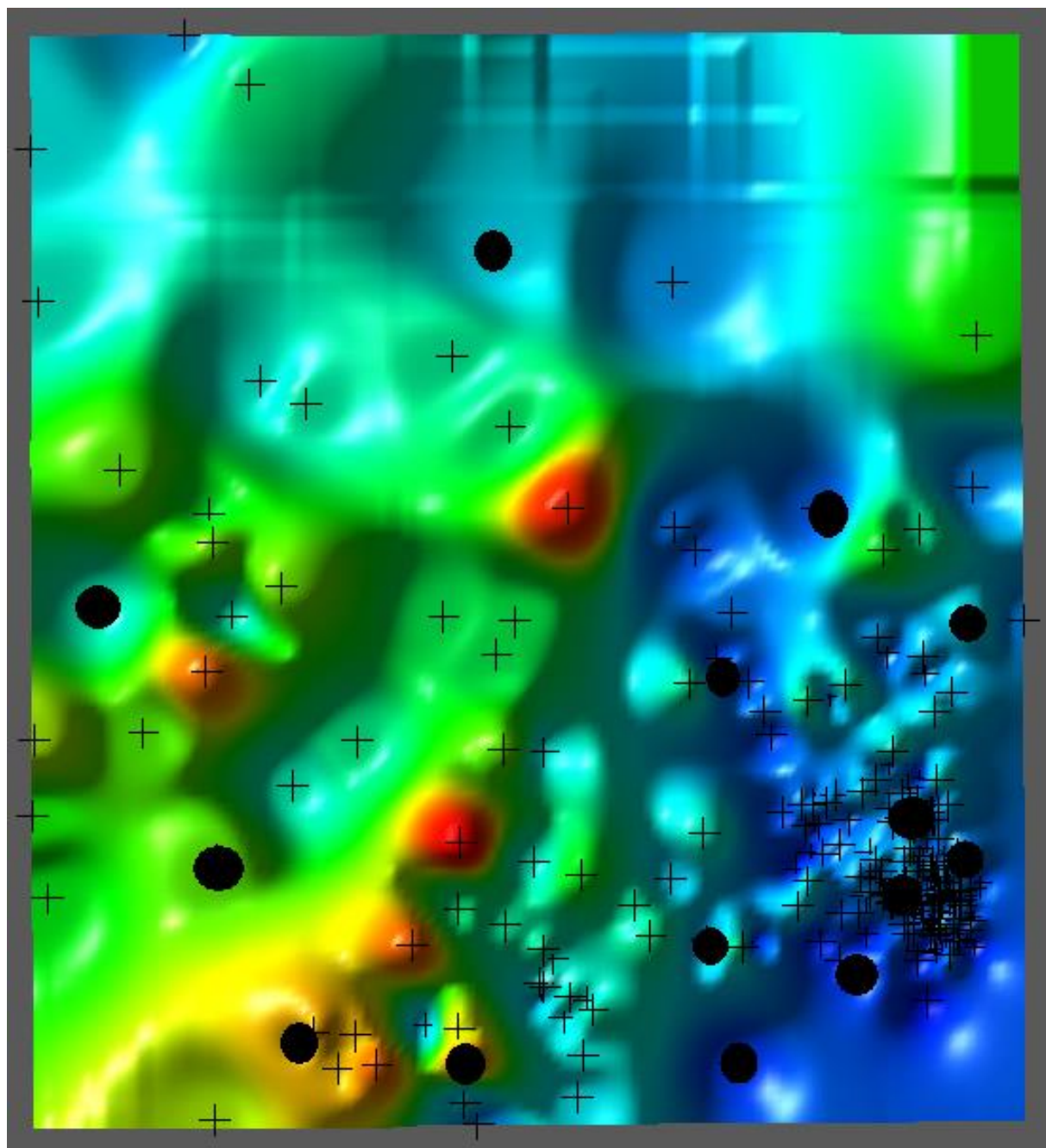
Эволюционные расчеты последовательно фокусируются на наиболее перспективной области пространства поиска



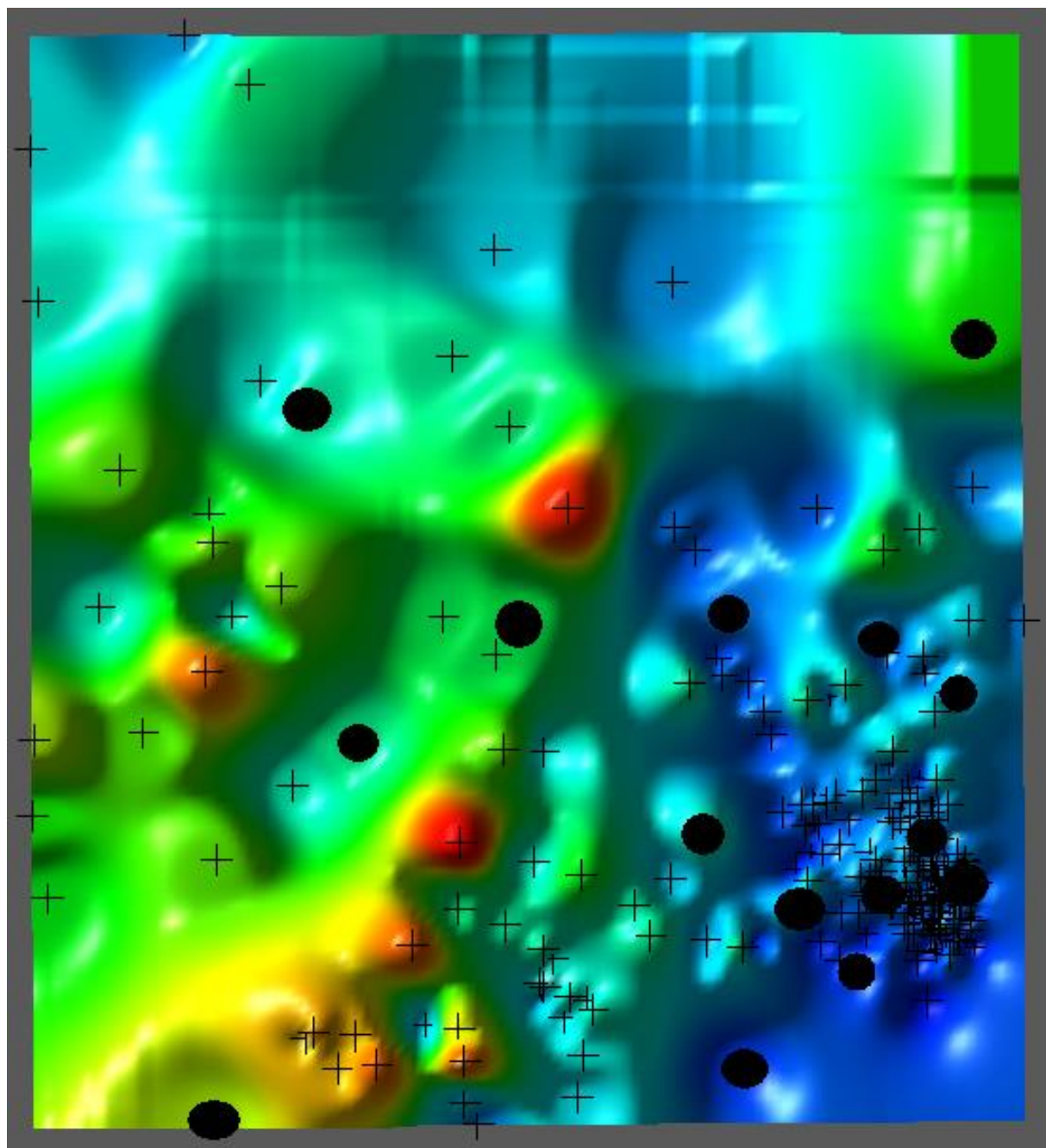
Эволюционные расчеты последовательно фокусируются на наиболее перспективной области пространства поиска



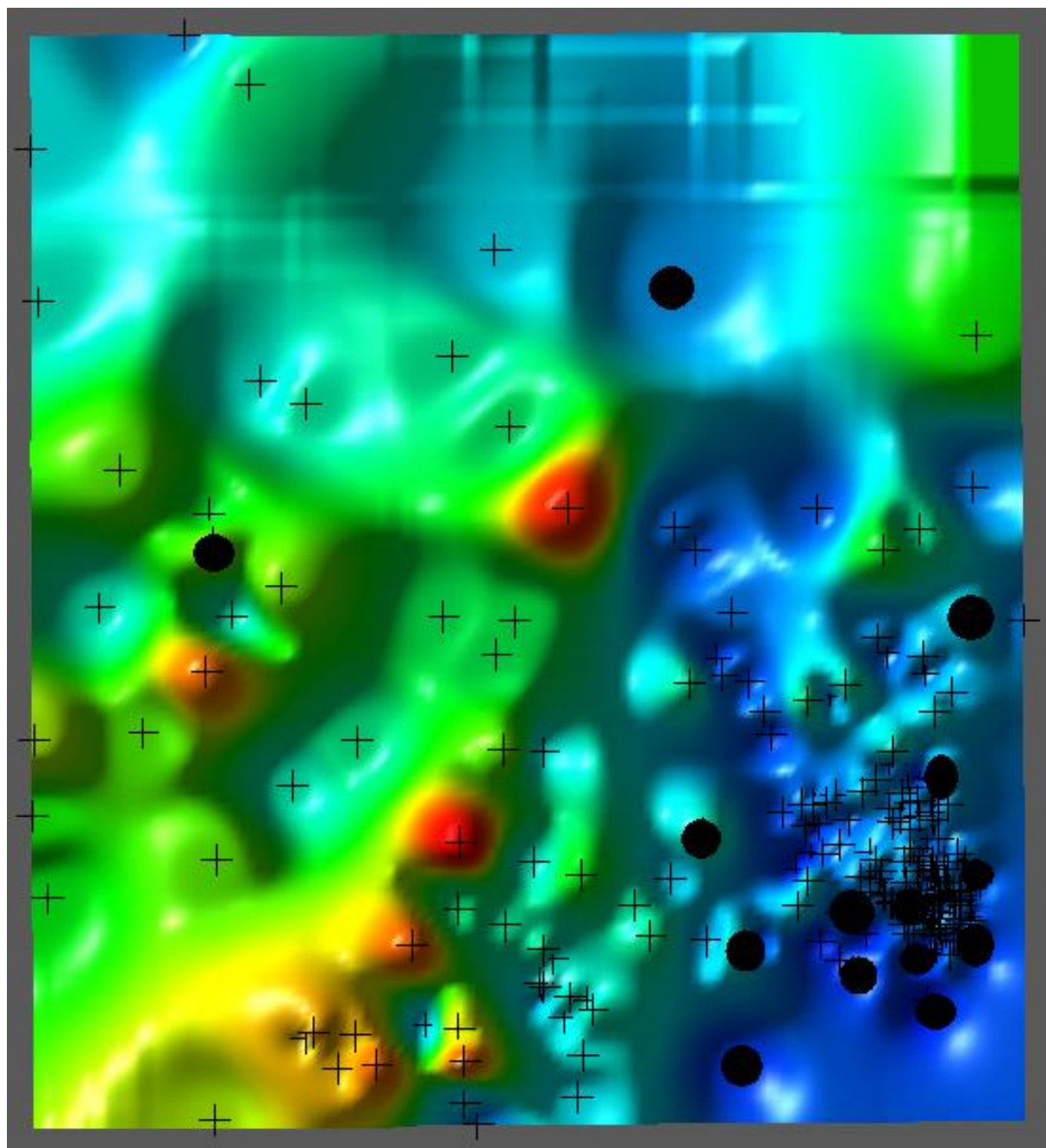
Эволюционные расчеты последовательно фокусируются на наиболее перспективной области пространства поиска



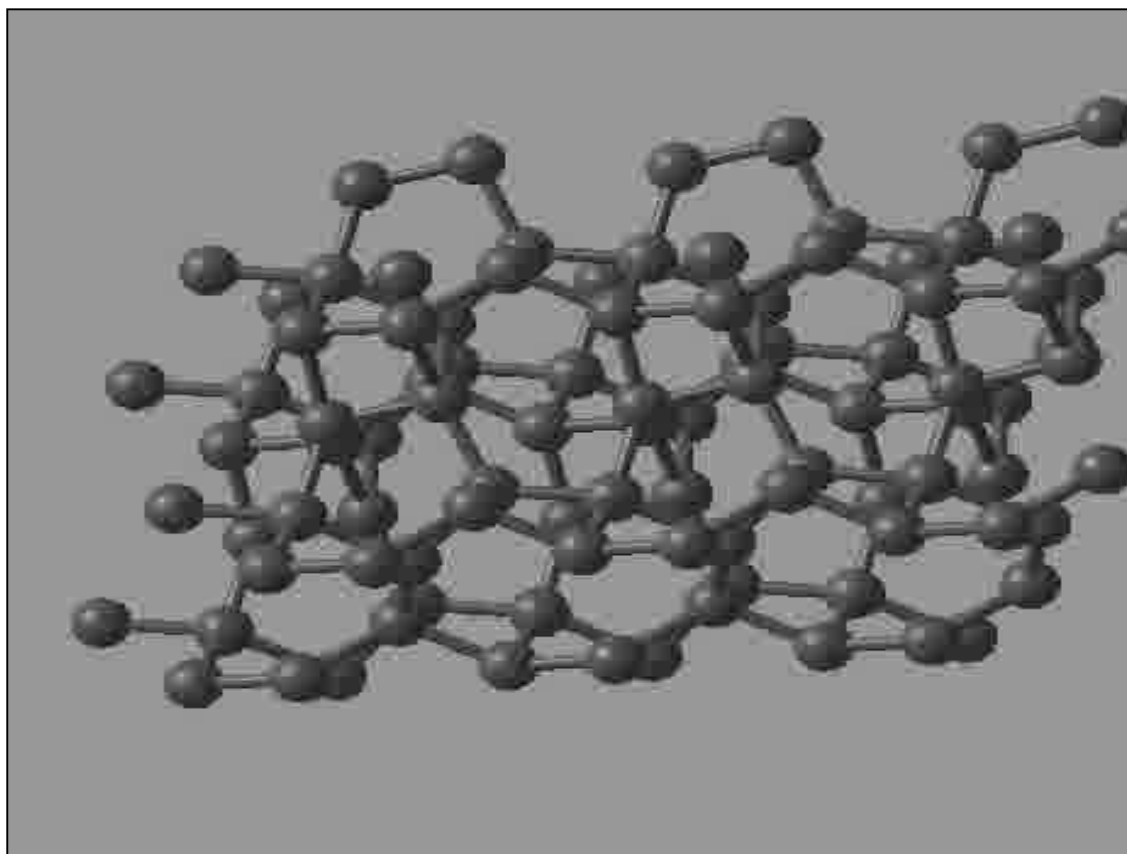
Эволюционные расчеты последовательно фокусируются на наиболее перспективной области пространства поиска



Эволюционные расчеты последовательно фокусируются на наиболее перспективной области пространства поиска



Предсказание кристаллических структур исходя лишь из законов физики - реальность



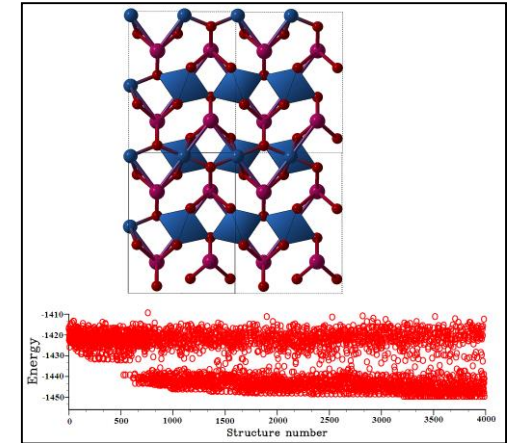
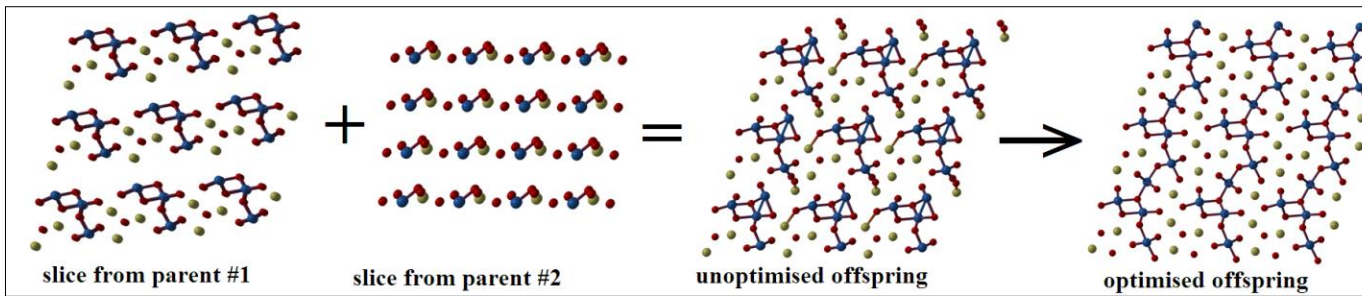
[видео]

Углерод при 100 ГПа: стабильная модификация - алмаз

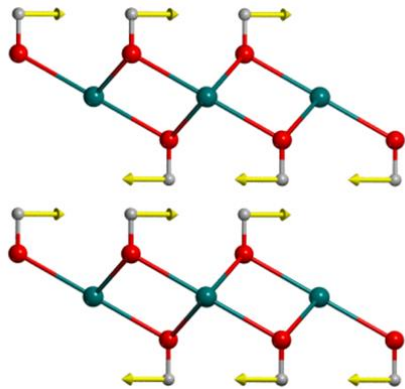
USPEX

(Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography)

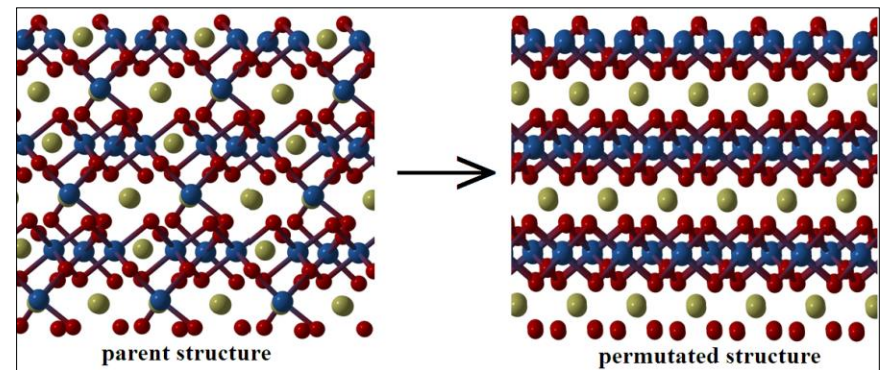
- (Случайные) начальные структуры
- Ранжирование структур по релаксированной энергии
- Отбор низкоэнергетических структур в качестве родителей нового поколения
- Стандартные вариационные операторы:



(1) Наследственность



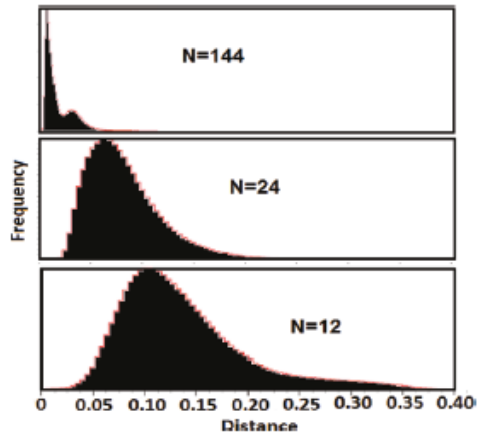
(2) Софтмутация



(3) Пермутация

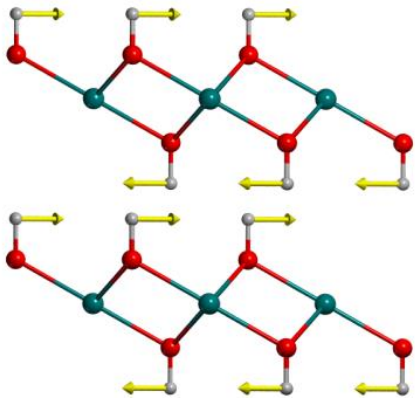
+ (4) Трансмутация, + (5) Ротационная мутация, + ...

Почему USPEX так хорошо работает?



Distribution of distances between randomly sampled local minima in a binary Lennard-Jones system AB_2 .

I. Сокращение размерности без введения произвола – симметричный и топологический генераторы случайных структур.



III. Вариационные операторы работают в подпространствах пониженной размерности.

formal dimensionality of full energy landscape: $d = 3N + 3$

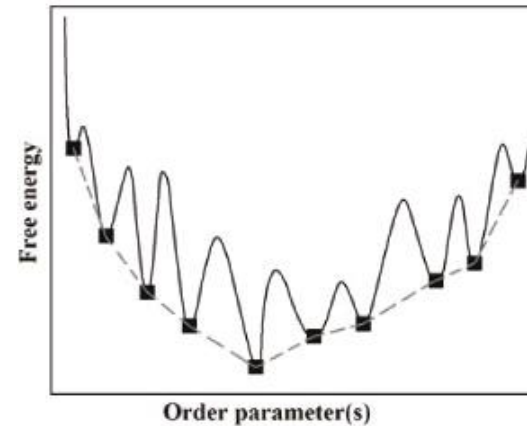
intrinsic dimensionality of reduced landscape: $d^* = 3N + 3 - \kappa$

number of distinct structures: $C^* \sim \exp(\beta d^*)$

$d^* = 10.9$ ($d = 39$) for Au_8Pd_4

$d^* = 11.6$ ($d = 99$) for $Mg_{16}O_{16}$

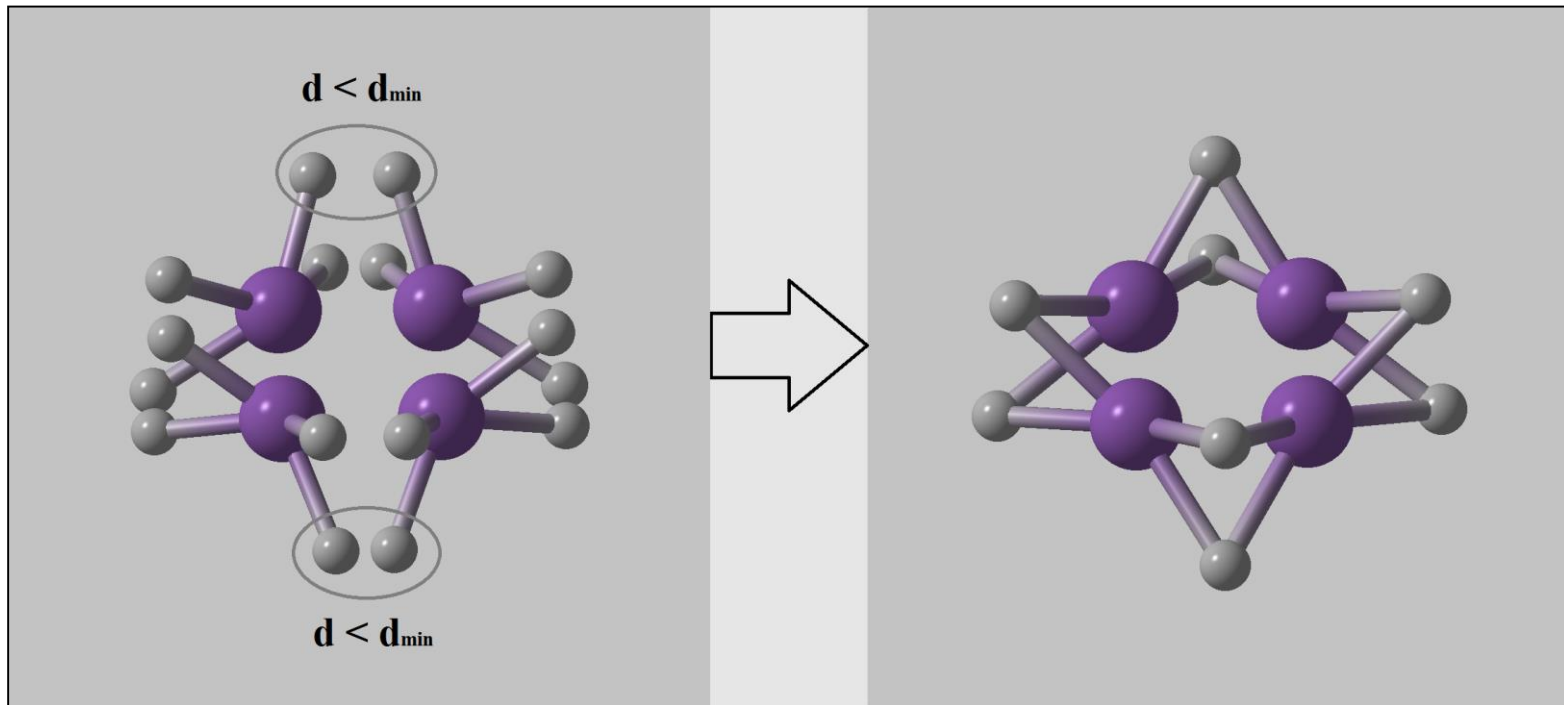
$d^* = 32.5$ ($d = 39$) for $Mg_4N_4H_4$



II. Сокращение эффективной размерности задачи благодаря релаксации структур (также убирает «шум» и преобразует ландшафт в более удобный).

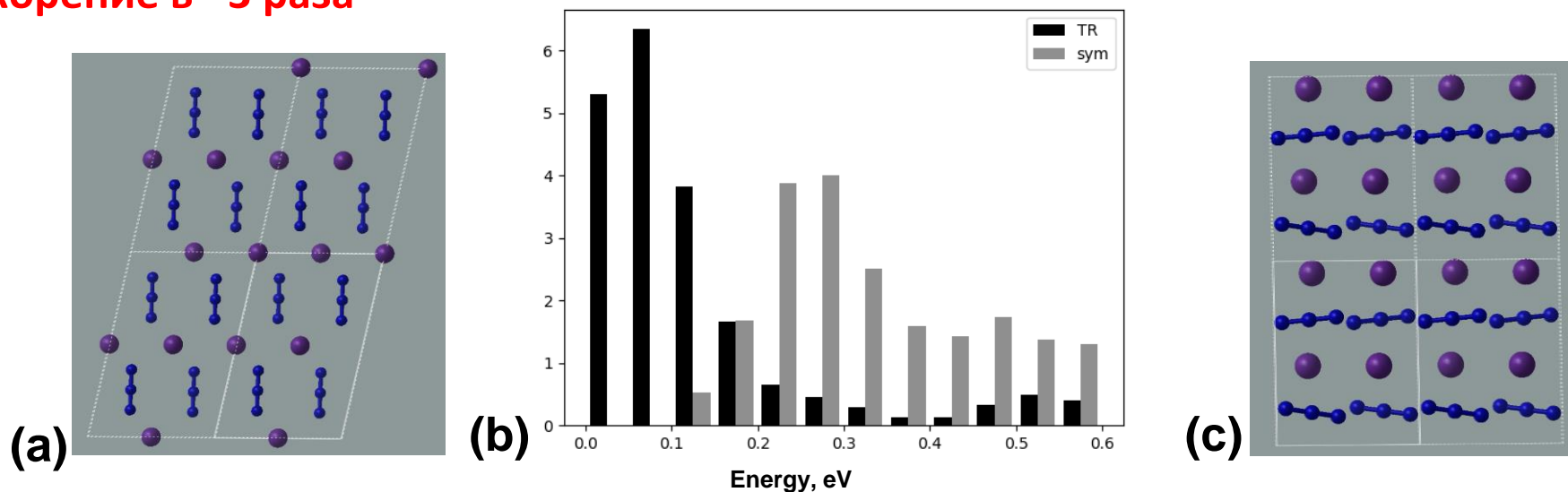
Симметричный генератор случайных структур

Кристаллы: 230 пространственных групп
Молекулы: точечные группы



Топологический генератор случайных структур (Bushlanov, Blatov, Oganov, 2019)

Ускорение в ~3 раза

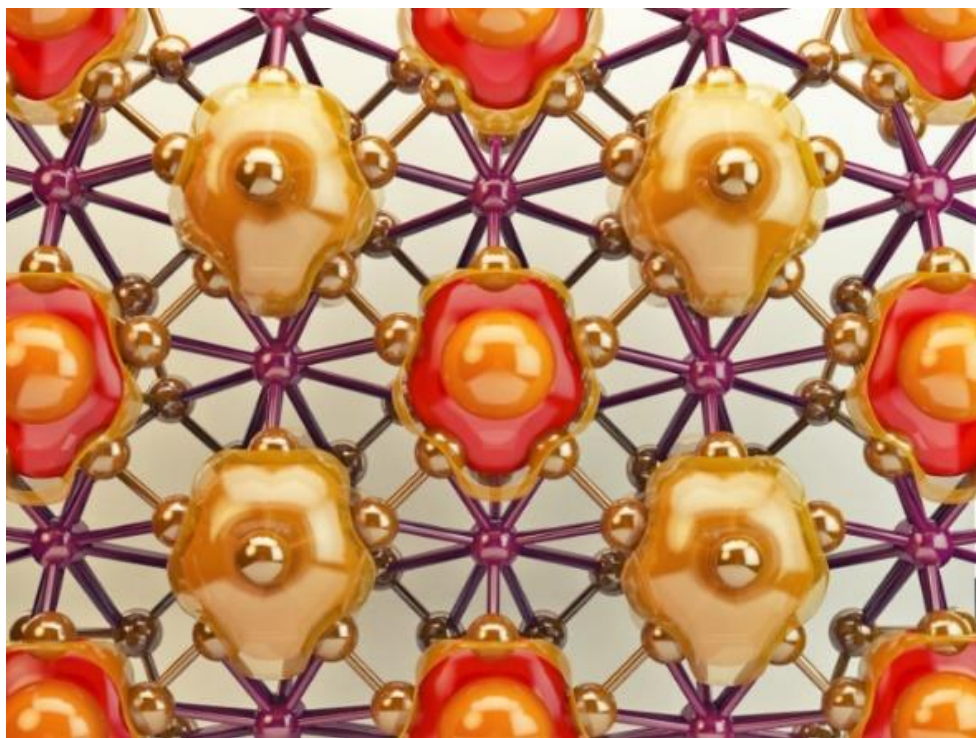


Пример KN_3 : (a) топологическая случайная структура, (c) симметрично-случайная структура, (b) распределение энергий топологических (TR) и симметрично-случайных («sym») структур.

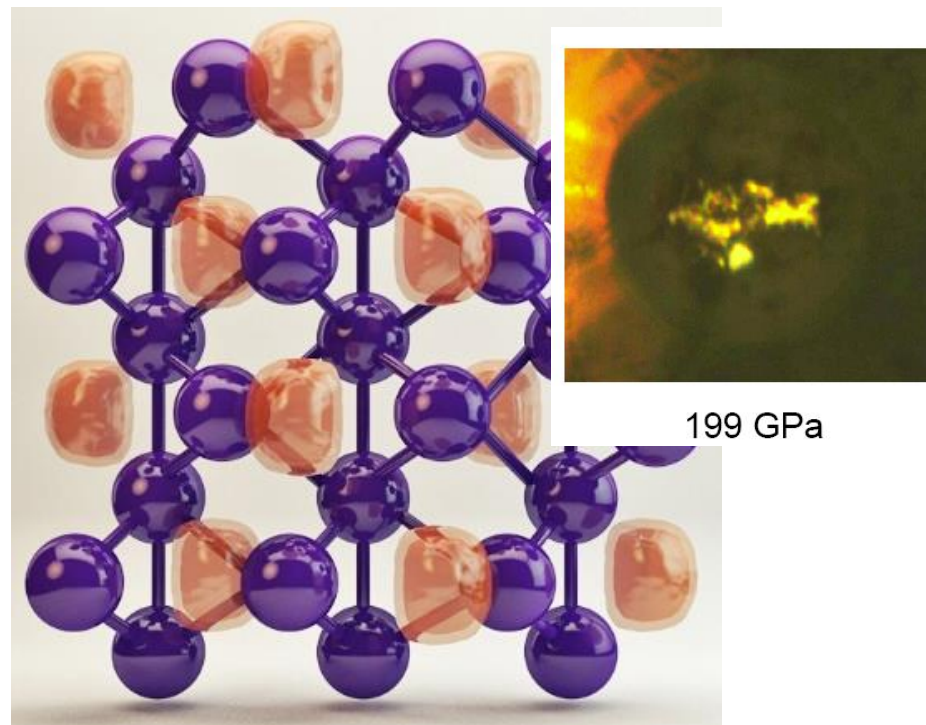
Статистика 100 расчетов для MgAl_2O_4 (28 атомов/ячейку) при 100 ГПа

	Старые USPEX	Адаптация на лету	Адаптация на лету и топологии
<Время расчета>	1307	1069	368
Процент успеха	100%	100%	100%

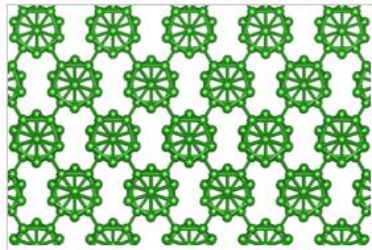
Без какой-либо эмпирики, метод надежно предсказывает кристаллические структуры



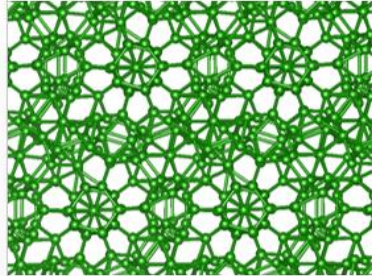
Новая сверхтвердая структура бора
(Oganov et al., *Nature*, 2009)



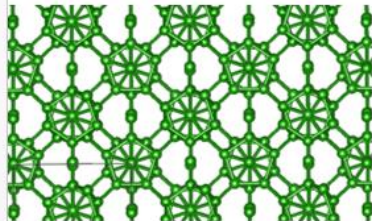
Прозрачный аллотроп натрия
(Ma, Eremets, Oganov, *Nature*, 2009)



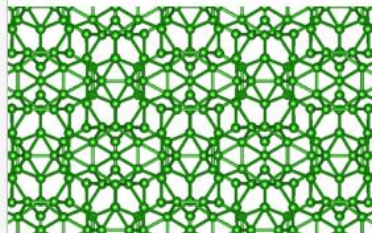
α -boron
 $E^{\text{DFT}} = -6.706$ eV/atom
Atoms: 12,
Space group: $R-3m$,
Core-hours: 10^3 AL-MTP vs. $3 \cdot 10^3$ DFT
 $|E^{\text{DFT}} - E^{\text{MTP}}| = 28.6$ meV/atom



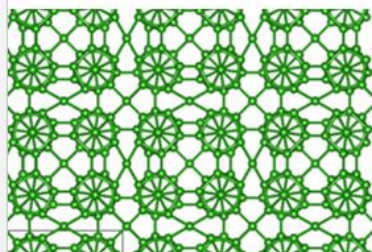
β -boron approximant
 $E^{\text{DFT}} = -6.704$ eV/atom,
Atoms: 106,
Space group: $P1$,
Core-hours: $7 \cdot 10^3$ AL-MTP vs. $6.6 \cdot 10^7$ DFT
 $|E^{\text{DFT}} - E^{\text{MTP}}| = 10.1$ meV/atom



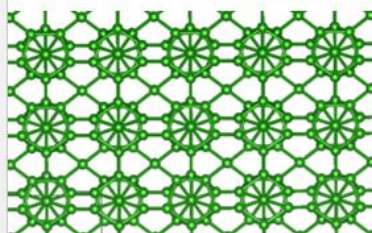
γ -boron
 $E^{\text{DFT}} = -6.678$ eV/atom
Atoms: 28,
Space group: $Pnnm$,
Core-hours: $2 \cdot 10^3$ AL-MTP vs. $2.5 \cdot 10^4$ DFT
 $|E^{\text{DFT}} - E^{\text{MTP}}| = 58.1$ meV/atom



$E^{\text{DFT}} = -6.667$ eV/atom,
Atoms: 54,
Space group: $Im-3$,
Core-hours: $3 \cdot 10^3$ AL-MTP vs. $3.5 \cdot 10^5$ DFT
 $|E^{\text{DFT}} - E^{\text{MTP}}| = 7.3$ meV/atom



$E^{\text{DFT}} = -6.667$ eV/atom,
Atoms: 52,
Space group: $P-42m$,
Core-hours: $3 \cdot 10^3$ AL-MTP vs. $3.2 \cdot 10^5$ DFT
 $|E^{\text{DFT}} - E^{\text{MTP}}| = 37.3$ meV/atom



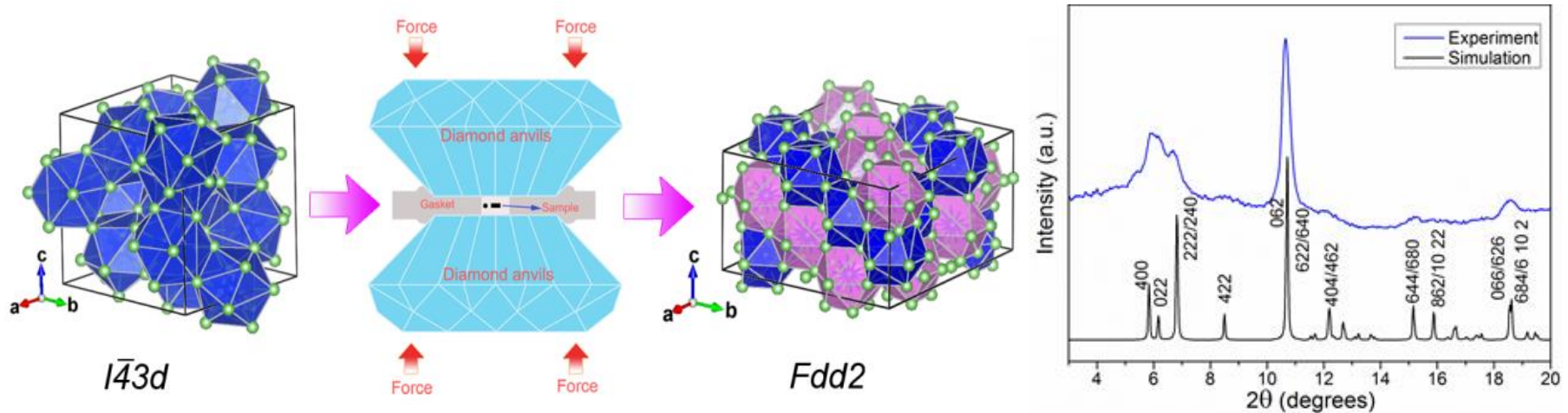
$E^{\text{DFT}} = -6.665$ eV/atom,
Atoms: 26,
Space group: $Cccm$,
Core-hours: $2 \cdot 10^3$ AL-MTP vs. $2.1 \cdot 10^4$ DFT
 $|E^{\text{DFT}} - E^{\text{MTP}}| = 13.6$ meV/atom

Искусственный интеллект вместо квантовой химии: путь к быстрым расчетам с квантовой точностью

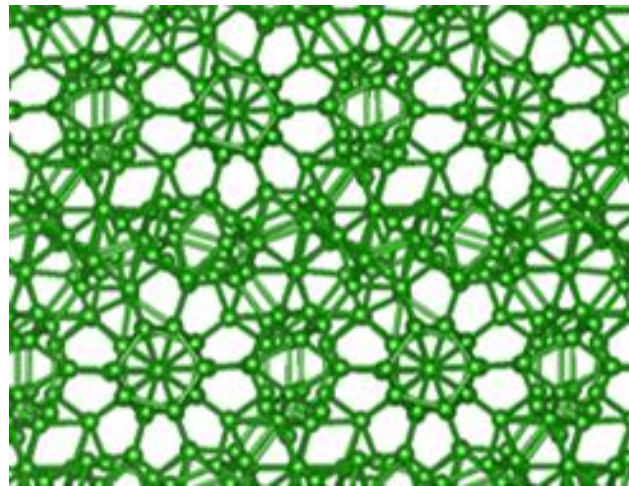
[Е.Podryabinkin, Е. Tikhonov, А. Shapeev, А.Р. Oganov, Phys. Rev. B, 2019]

- **Moment tensor potential (Shapeev, 2016).**
- **Расчет находит α -, β -, γ -, T52 аллотропы бора.**
- **Предсказана новая метастабильная фаза с кубической $c/54$ структурой.**
- **Ускорение в 100-10000 раз.**

Cases of record complexity:
 - $\text{Li}_{15}\text{Si}_4$ with 152 atoms/cell
 -disordered β -boron with 106 atoms/cell

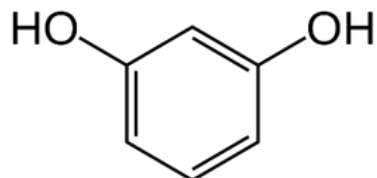


Structural transformation of $\text{Li}_{15}\text{Si}_4$ at 7 GPa. New phase has more attractive properties for use in Li-batteries. [Zeng & Oganov, *Adv. Energy Mat.*, 2015]

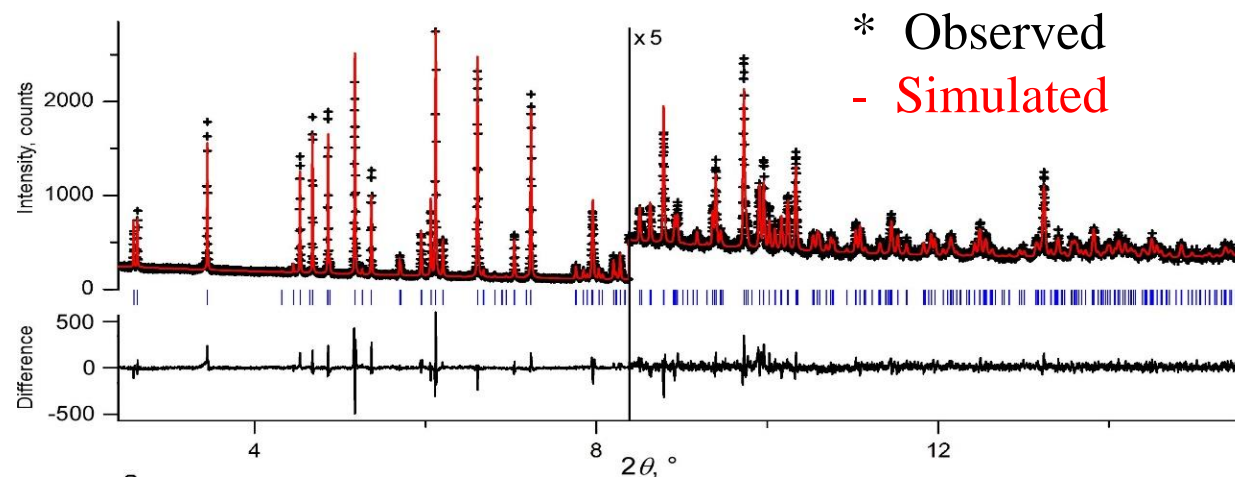


Crystal structure of β -boron at ambient conditions.
 [Podryabinkin, Shapeev & Oganov, *Phys. Rev. B*, 2019]

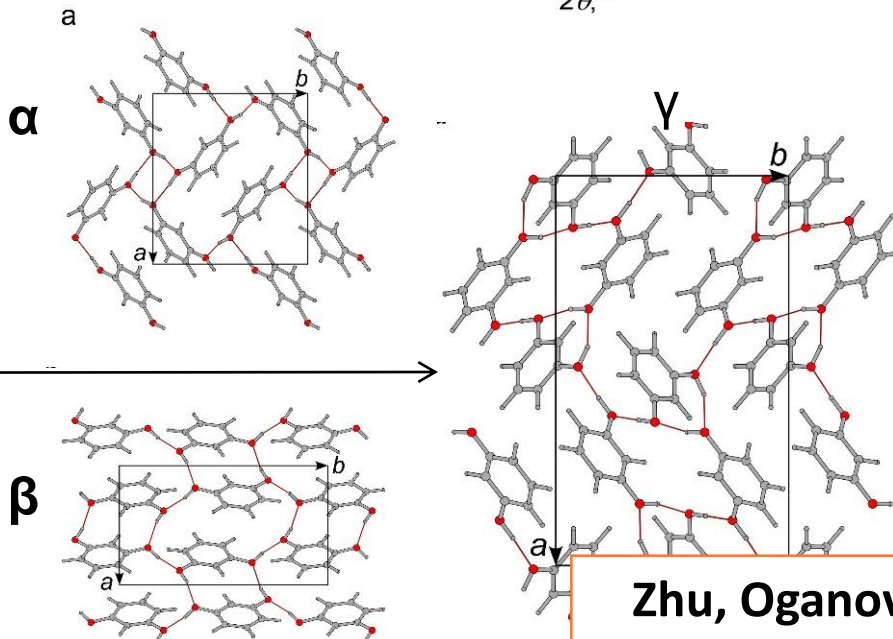
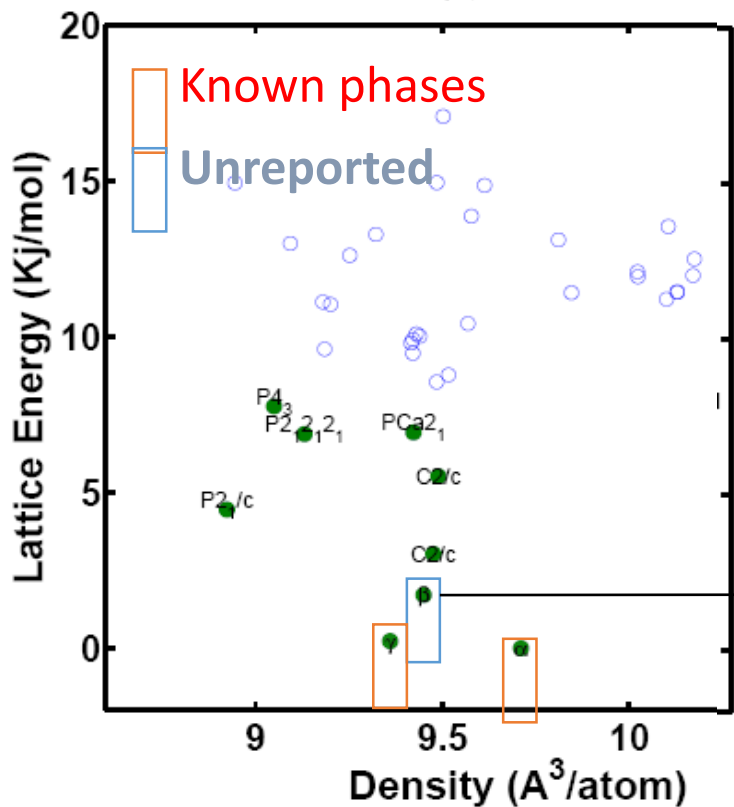
USPEX может работать и с молекулярными кристаллами:
 пример γ -резорцина



Сравнение дифрактограмм



Lattice Energy Plot

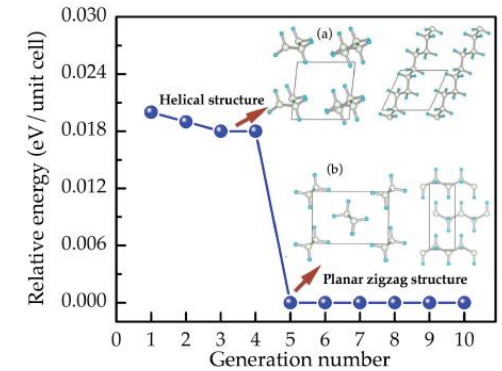
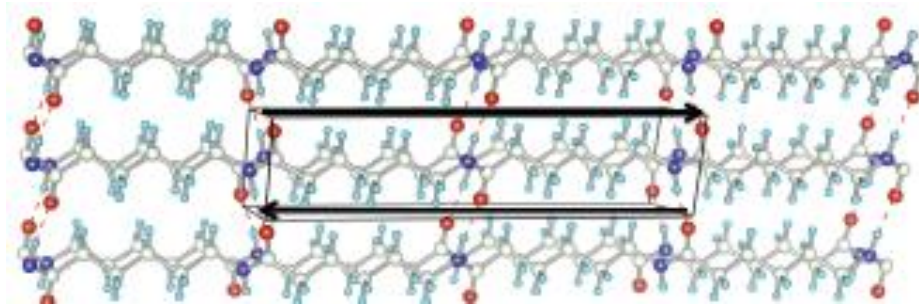


Zhu, Oganov, et al,
 JACS, 2016

Предсказание полимеров для гибких конденсаторов

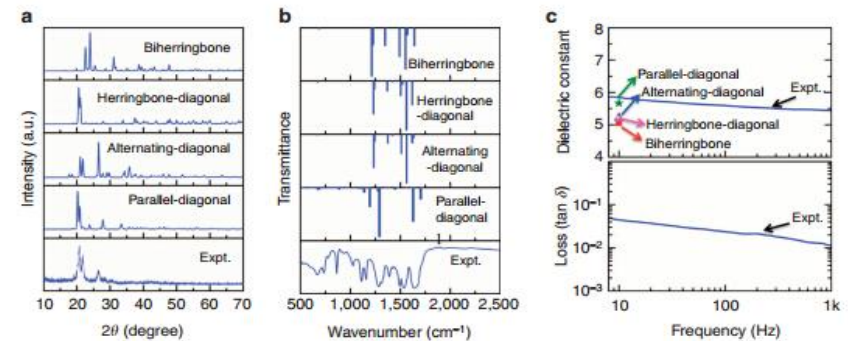
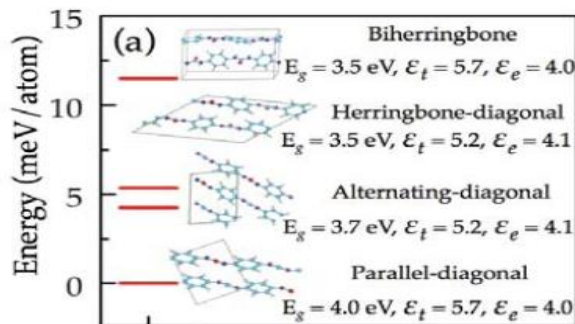
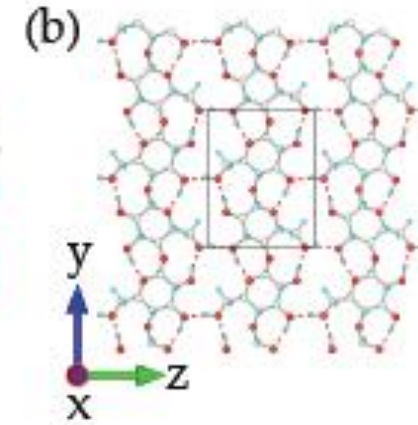
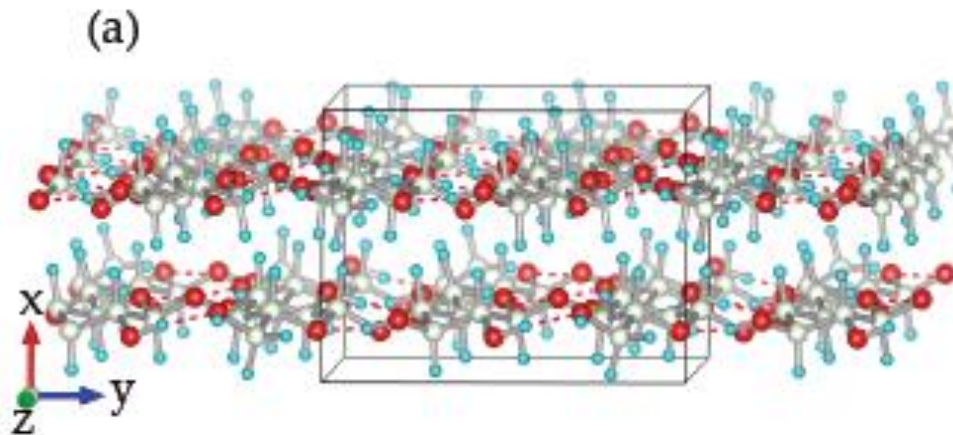
(Zhu, Sharma, Oganov: *J.Chem.Phys.* 2014, *Nature Commun.* 2014)

**Nylon-6
test**



Тест на полиэтилене

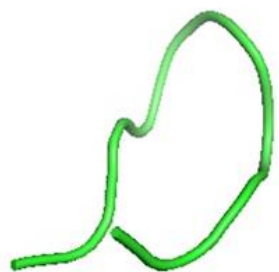
**Cellulose
test**



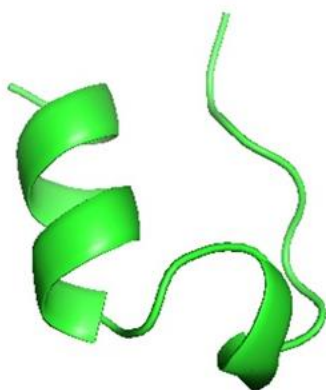
Предсказание 3 новых high-k полимеров

Экспериментальное подтверждение

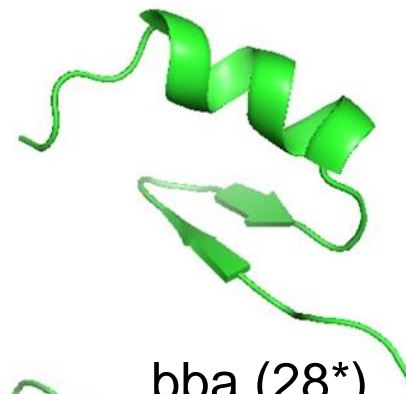
Структуры белков также можно предсказывать с помощью USPEX [Rachitsky, Kruglov, Finkelstein, Oganov, submitted]



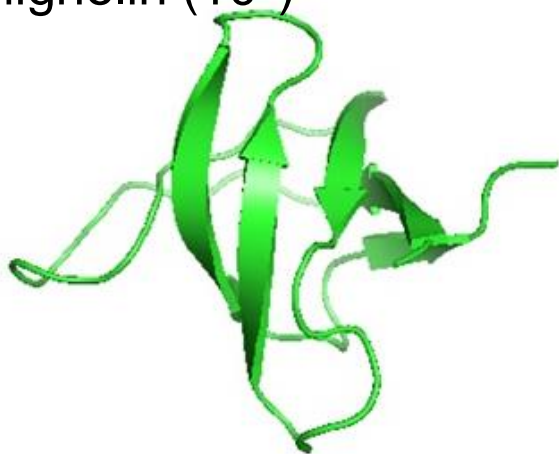
Chignolin (10*)



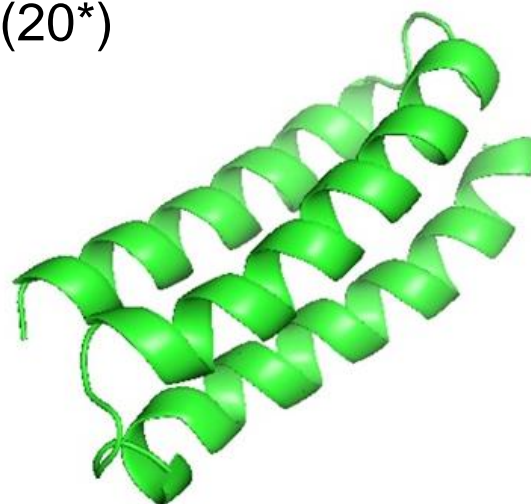
Trp-cage (20*)



bba (28*)



1shf (58*)



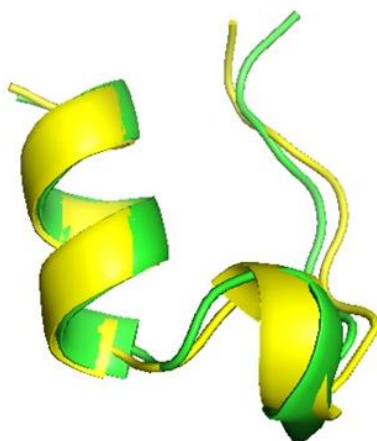
2a3d (73*)

* Число аминокислотных остатков

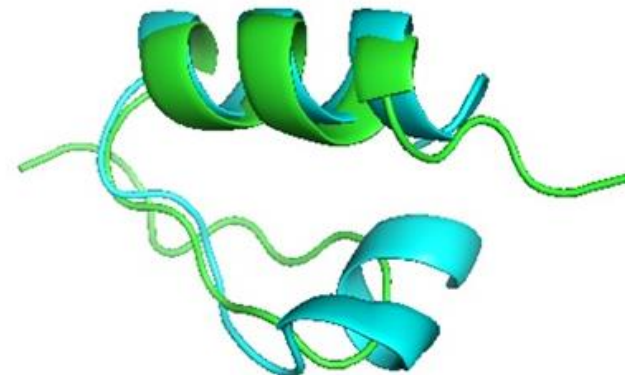
Сравнение предсказаний USPEX с экспериментом [Rachitsky, Kruglov, Finkelstein, Oganov, submitted]



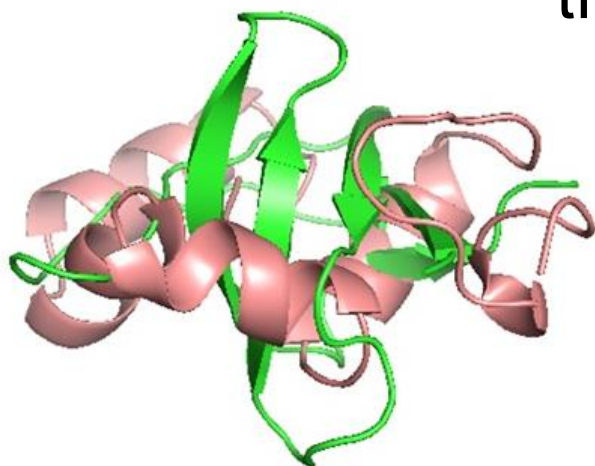
chignolin



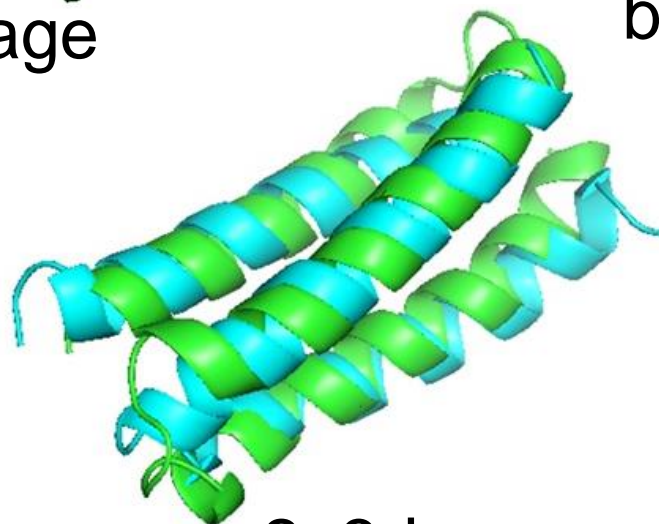
trp-cage



bba

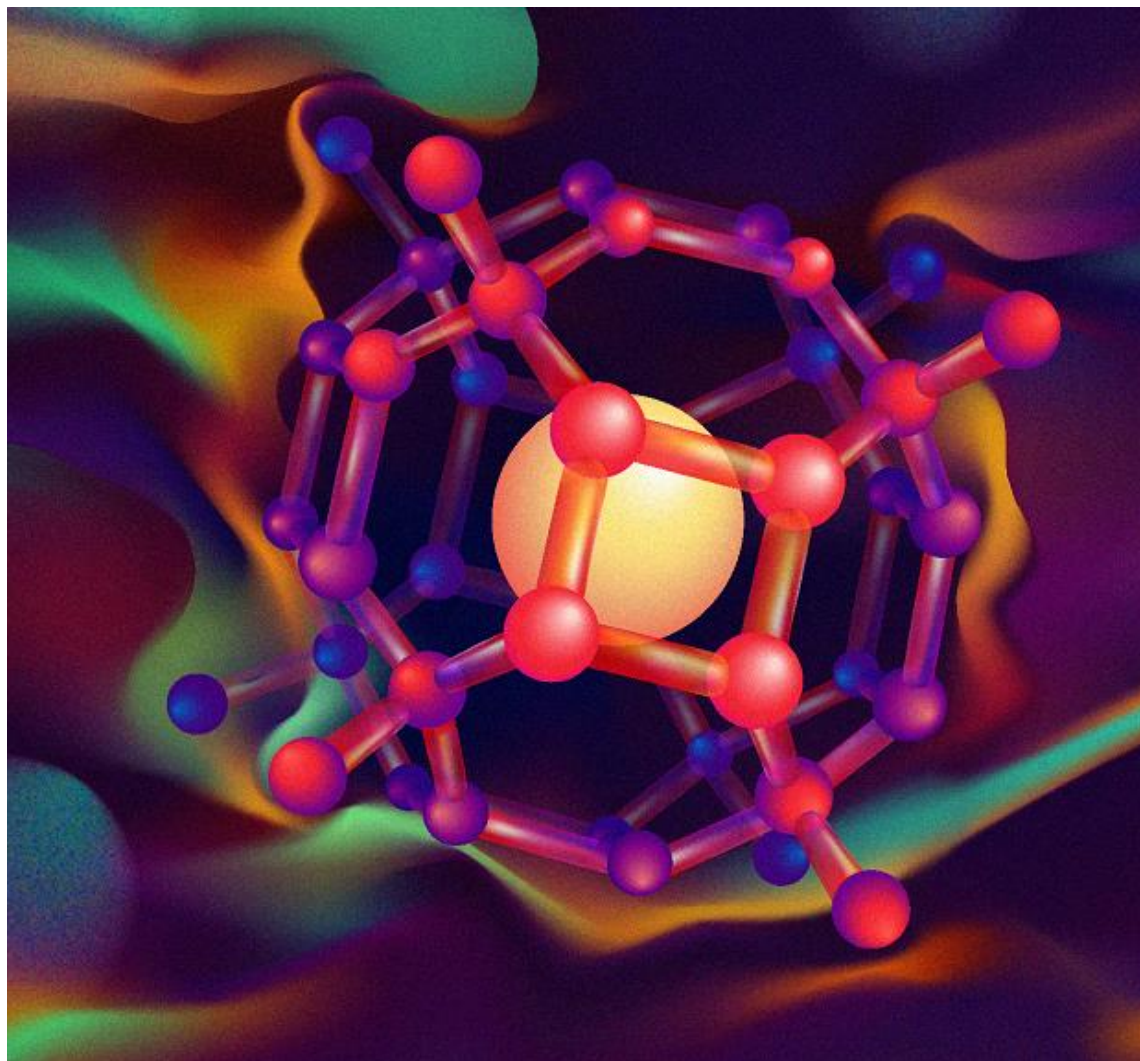


1shf



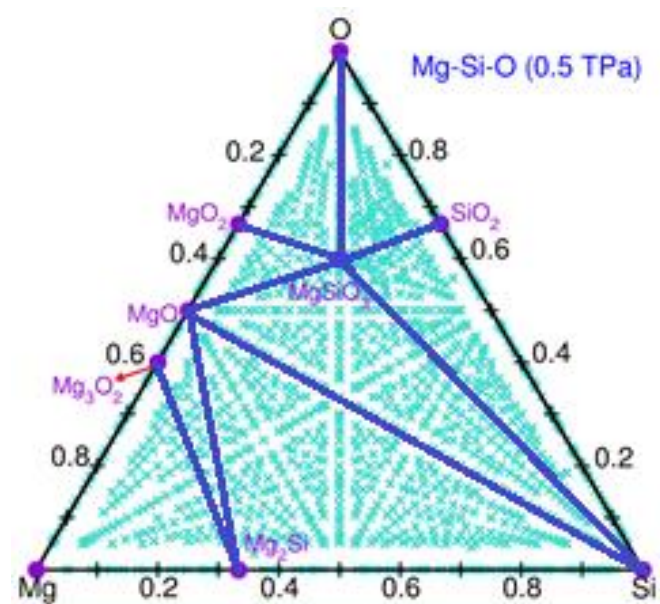
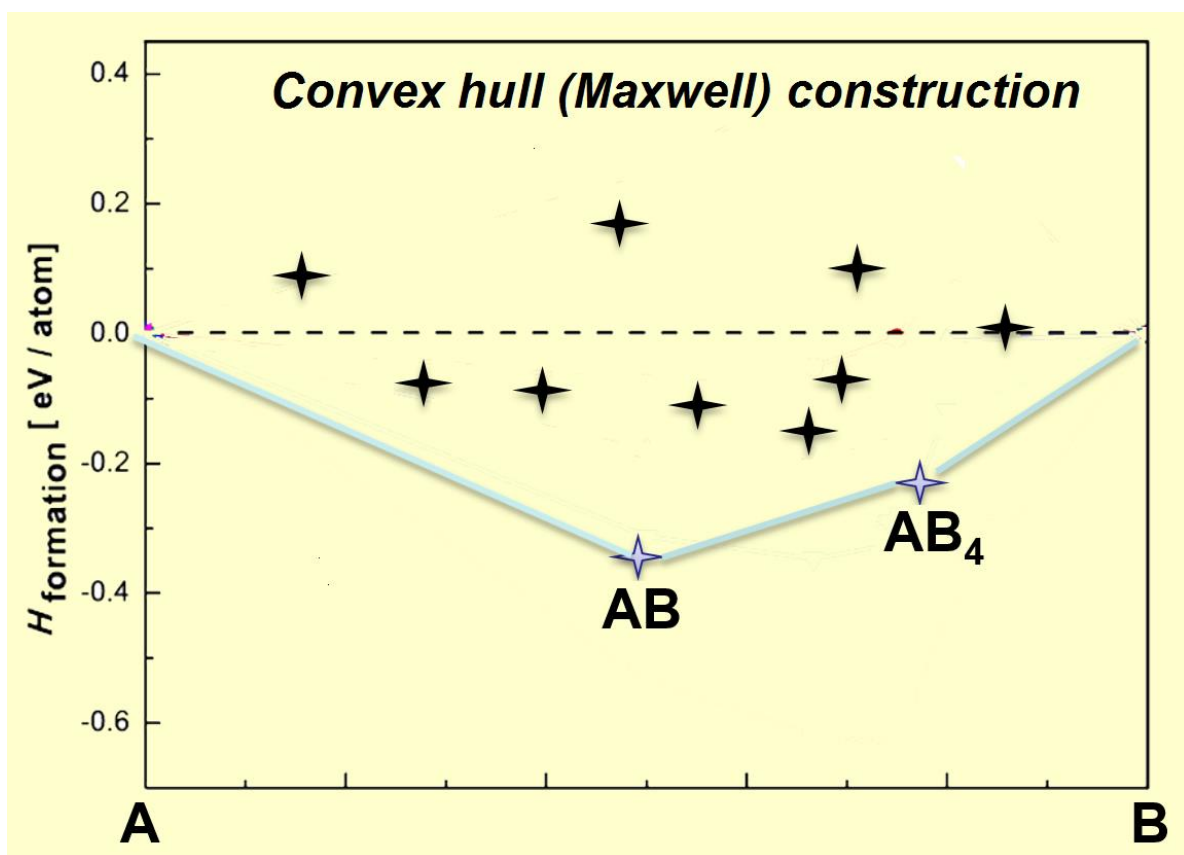
2a3d

Как предсказать стабильные химические соединения?



Предсказание стабильных соединений – через конструкцию Максвелла («выпуклая оболочка», convex hull)

Термодинамическая стабильность в многокомпонентной системе



3-компонентная система
Mg-Si-O при 500 ГПа
(Niu & Oganov, *Sci. Rep.* 2015)

Стабильное соединение – ниже любой линии распада!

Пример: предсказание и открытие нового минерала золота

- Streltsov, Oganov, Khomskii (PNAS, 2018): предсказали стабильность AuTe.

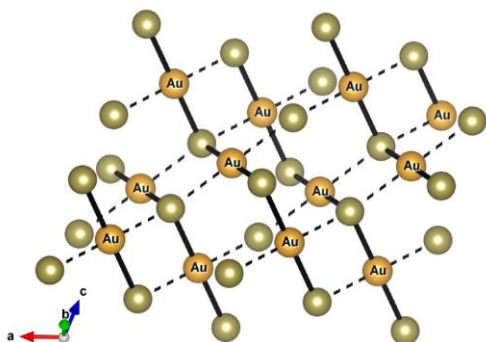
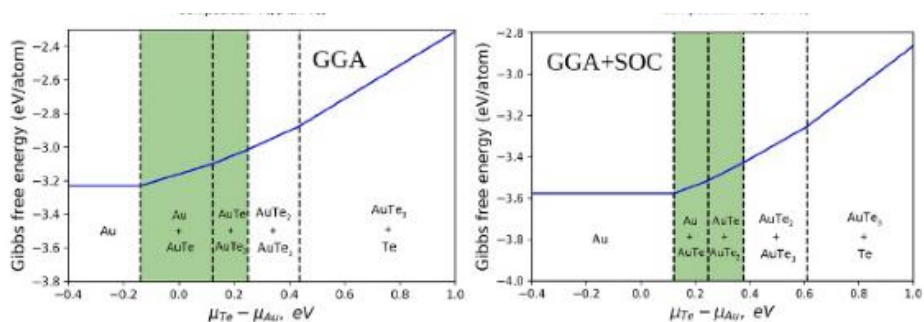


Fig. 6. The crystal structure of AuTe. Thick solid and dashed lines correspond to short and long Au-Te bonds, respectively.

Предсказанная кристаллическая структура AuTe.



Область стабильности AuTe уже, чем у AuTe₂ (калаверита), особенно после учета спин-орбитального взаимодействия.

- Пальянова, Толстых, Бортников (ДАН, 2019), Tolstykh et al. (Min. Mag., 2018): обнаружили AuTe в проявлении Гачинг (Камчатка) и в экспериментах.

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2019, том 487, № 4, с. 432–437

ГЕОХИМИЯ

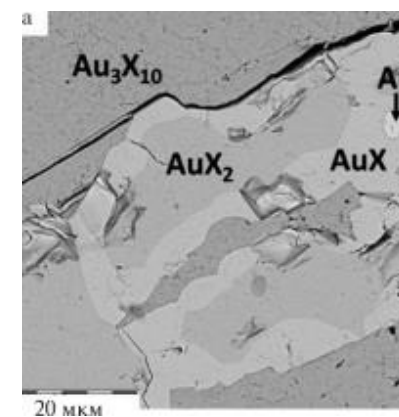
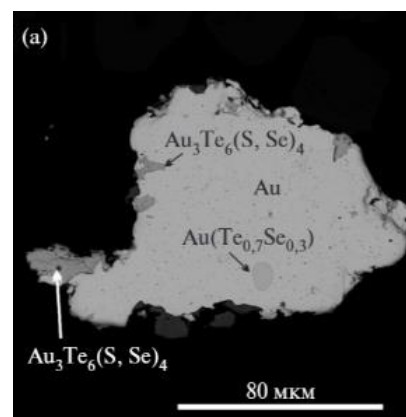
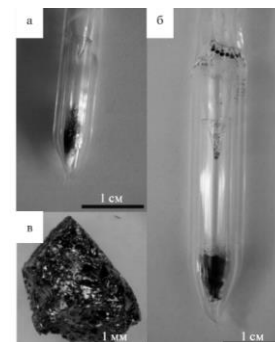
УДК 661.8

СИНТЕТИЧЕСКИЕ ХАЛЬКОГЕНИДЫ ЗОЛОТА В СИСТЕМЕ Au-Te-Se-S И ИХ ПРИРОДНЫЕ АНАЛОГИ

Г. А. Пальянова^{1,2,*}, Н. Д. Толстых^{1,2}, В. Ю. Зинина^{1,2}, К. А. Кох^{1,2},
Ю. В. Серёткин^{1,2}, академик РАН Н. С. Бортников³

Поступило 22.04.2019 г.

Впервые в системе Au-Te-Se-S (где $Te \geq Se+S$) синтезированы четверные халькогениды состава AuX (AuTe_{0,75}Se_{0,25}S_{0,1}), Au₃X₁₀ (Au₃Te₂Se₂S_{1,3}) и AuX₂ (AuTe_{1,8}Se_{0,2}), AuTe_{1,8}Se_{0,1}S_{0,1}). Они получены методом сухого синтеза — при нагревании смеси элементарных веществ, соответствующих составам AuTe_{0,666}Se_{0,167}S_{0,167} (X/Au = 1, X = Σ(Te+Se+S)), AuTeSe_{0,5}Se_{0,5} (X/Au = 2), AuTeSe_{1,125}S_{0,125} (X/Au = 3,5) и AuTe_{2,5}Se_{0,5} (X/Au = 4), в вакуумированных кварцевых ампулах от 25 до 700 °C и отжиге при 400 °C. Согласно результатам рентгенофазового анализа, синтетические халькогениды золота состава AuTe_{1,8}(Se, S)_{0,2} соответствуют калавериту (α-AuTe₂). Присутствующие на дифрактограммах неидентифицированные пики принадлежат AuX и Au₃X₁₀. Они, очевидно, являются синтетическими аналогами



Природный (слева) и синтетический (справа) образцы, содержащие фазу AuTe.

В экстремальных условиях химия меняется

H 1																	He 2
Li 3	Be 4											B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10
Na 11	Mg 12											Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18
K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36
Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54
Cs 55	Ba 56	La 57	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86
Fr 87	Ra 88	Ac 89	Ru 104	Ha 105	Unh 106	Uns 107	Uno 108	Une 109									
		Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70	Lu 71		
		Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103		

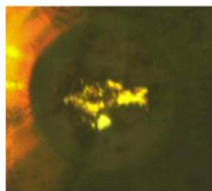
$P = 0$ ■
 $P > 0$ ■

При 100 ГПа кислород становится сверхпроводником!

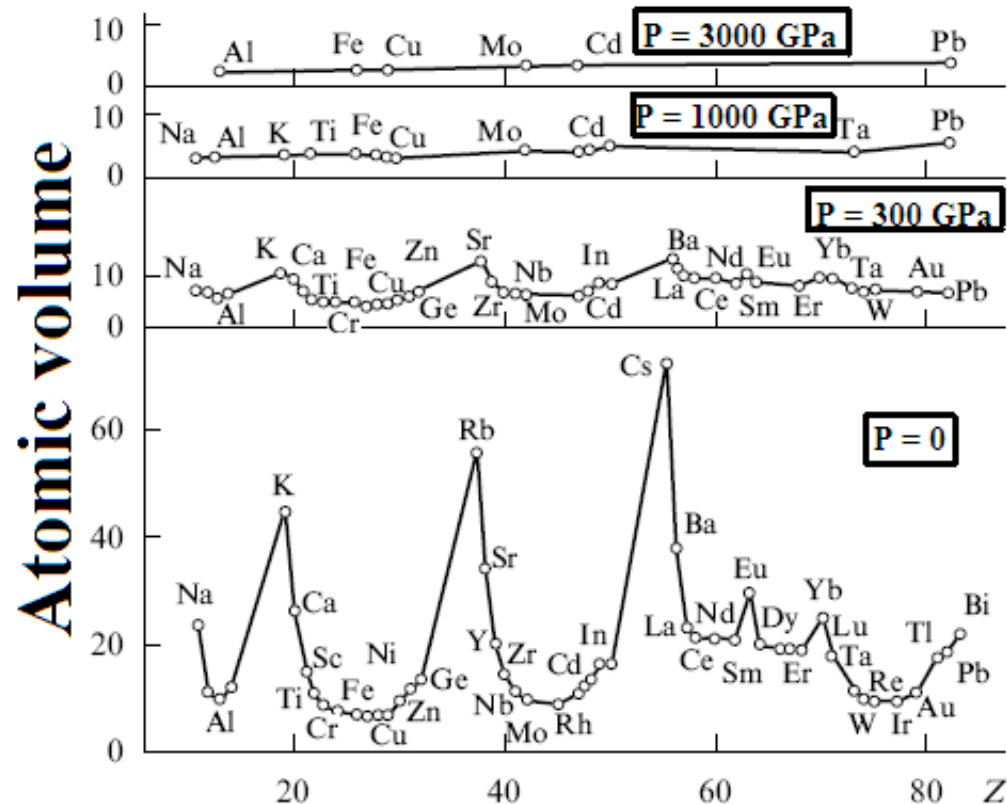
K. Shimizu et al., Nature 393, 767-769 (1998).

При 200 ГПа натрий становится прозрачным неметаллом

Y. Ma, M. Eremets, A.R. Oganov, Nature 458, 182-185 (2009).



199 GPa



Периодический закон перестает работать при сверхвысоких давлениях

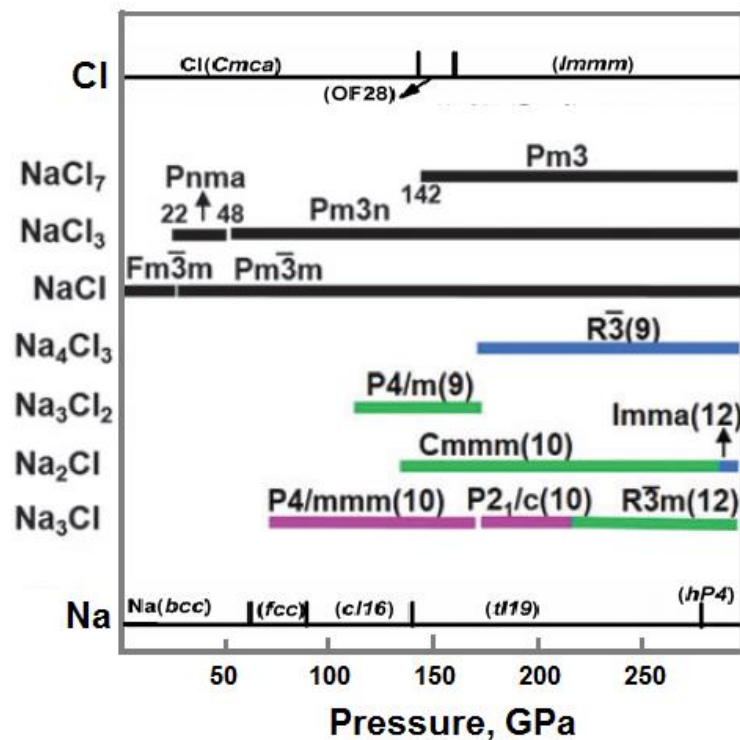
Альтшулер Л.В., Трунин Р.Ф., Урлин В.Д., Фортов В.Е., Фунтиков А.И. УФН 169, 323-344 (1999)

[Фортов В.Е. Экстремальные состояния вещества. Москва: Физматлит, 2009]

Необычная химия самого обычного вещества

Na_3Cl , Na_2Cl , Na_3Cl_2 , NaCl , NaCl_3 , NaCl_7 устойчивы под давлением

[Zhang W., Oganov A.R., et al. *Science* 342, 1502-1505]

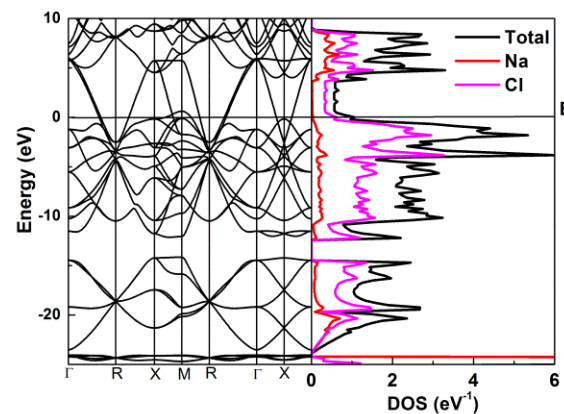
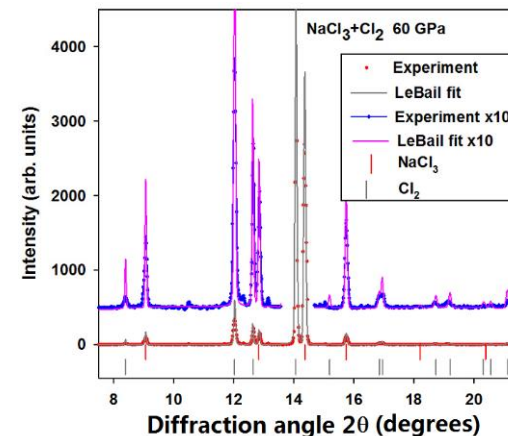
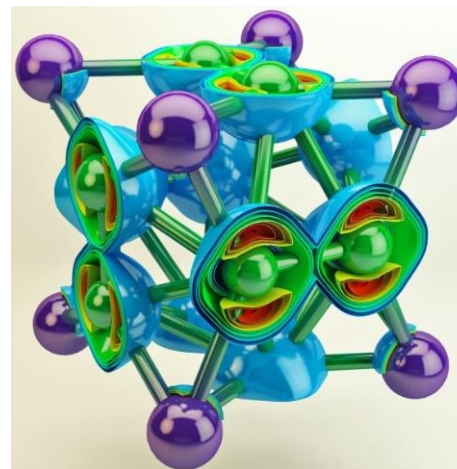


Области устойчивости хлоридов натрия

Химические аномалии:

Двухвалентный хлор в Na_2Cl .

Сосуществование металлических и ионных блоков в Na_3Cl .

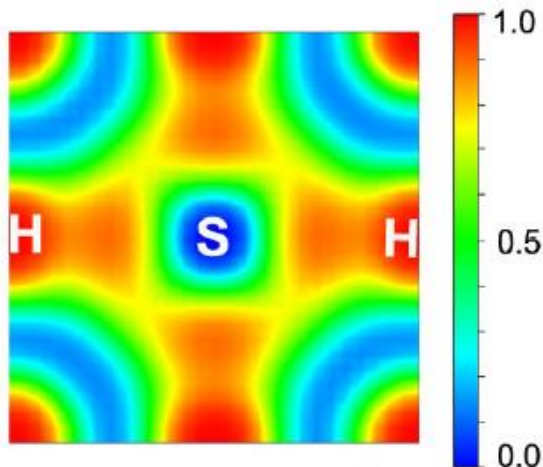


NaCl_3 : атомная и электронная структура, и дифракционный спектр

[Zhang, Oganov, et al., *Science* (2013)]

[Saleh & Oganov, *PCCP* (2015)]

Новый рекорд сверхпроводимости, полученный благодаря USPEX



OPEN

Pressure-induced metallization of dense $(\text{H}_2\text{S})_2\text{H}_2$ with high- T_c superconductivity

SUBJECT AREAS:
THEORY AND
COMPUTATION
CONDENSEDMATTER PHYSICS

Defang Duan^{1,2}, Yunxian Liu¹, Fubo Tian¹, Da Li¹, Xiaoli Huang¹, Zhonglong Zhao¹, Hongyu Yu¹, Bingbing Liu¹, Wenjing Tian² & Tian Cui¹

¹State Key Laboratory of Superhard Materials, College of physics, Jilin University, Changchun, 130012, P. R. China, ²State Key Laboratory of Supramolecular Structure and Materials, Jilin University, Changchun, 130012, P. R. China.

Received
7 July 2014

Accepted
29 September 2014

Published
10 November 2014

Correspondence and
requests for materials
should be addressed to
T.C. (tcui@jl.u.edu.
cn)

The high pressure structures, metallization, and superconductivity of recently synthesized H_2 -containing compounds $(\text{H}_2\text{S})_2\text{H}_2$ are elucidated by *ab initio* calculations. The ordered crystal structure with $P1$ symmetry is determined, supported by the good agreement between theoretical and experimental X-ray diffraction data, equation of states, and Raman spectra. The Ccm structure is favorable with partial hydrogen bond symmetrization above 37 GPa. Upon further compression, H_2 molecules disappear and two intriguing metallic structures with $R3m$ and $Im-3m$ symmetries are reconstructive above 111 and 180 GPa, respectively. The predicted metallization pressure is 111 GPa, which is approximately one-third of the currently suggested metallization pressure of bulk molecular hydrogen. Application of the Allen-Dynes-modified McMillan equation for the *Im-3m* structure yields high T_c values of 191 K to 204 K at 200 GPa, which is among the highest values reported for H_2 -rich van der Waals compounds and MH_3 type hydride thus far.

SCIENTIFIC REPORTS | 4 : 6968 | DOI: 10.1038/srep06968

1

Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system

A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov & S. I. Shylin

Nature (2015) | doi:10.1038/nature14964

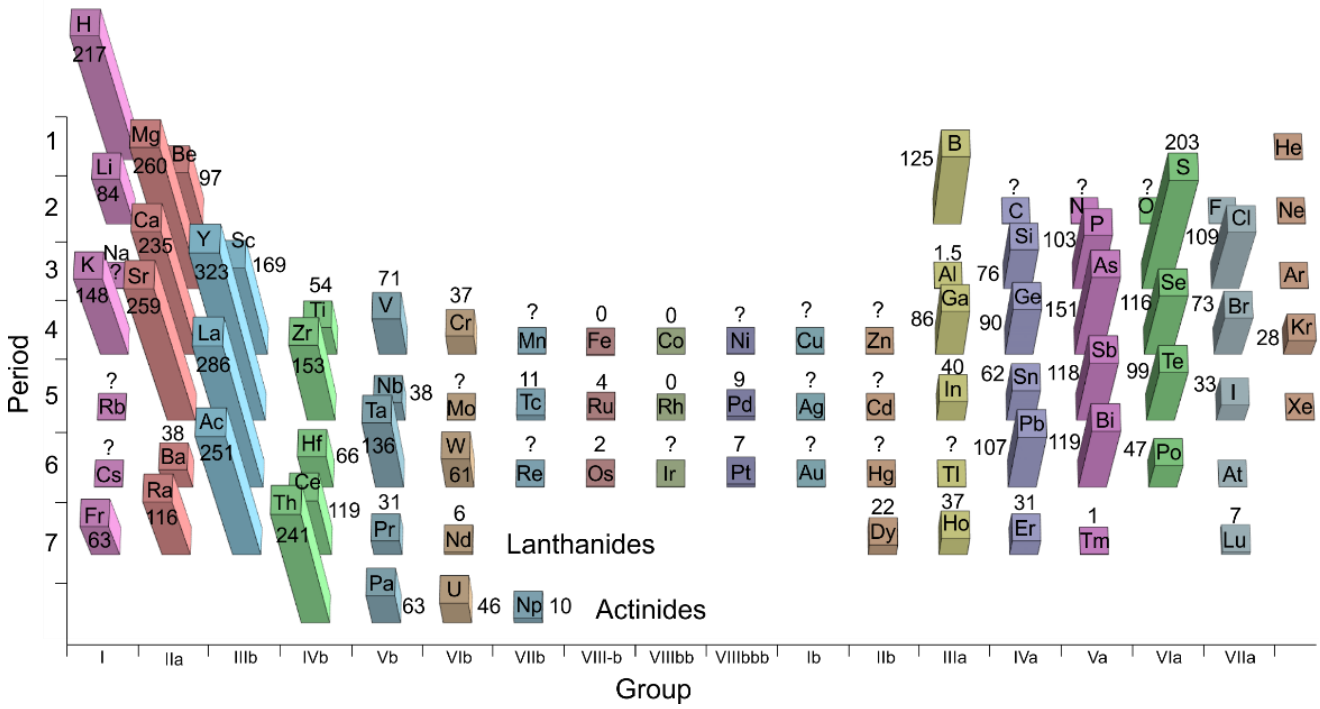
Received 25 June 2015 | Accepted 22 July 2015 | Published online 17 August 2015

A superconductor is a material that can conduct electricity without resistance below a superconducting transition temperature, T_c . The highest T_c that has been achieved to date is in the copper oxide system¹: 133 kelvin at ambient pressure² and 164 kelvin at high pressures³. As the nature of superconductivity in these materials is still not fully understood (they are not conventional superconductors), the prospects for achieving still higher transition temperatures by this route are not clear. In contrast, the Bardeen–Cooper–Schrieffer theory of conventional superconductivity gives a guide for achieving high T_c with no theoretical upper bound—all that is needed is a favourable combination of high-frequency phonons, strong electron–phonon coupling, and a high density of states⁴. These conditions can in principle be fulfilled for metallic hydrogen and covalent compounds dominated by hydrogen^{5, 6}, as hydrogen atoms provide the necessary high-frequency phonon modes as well as the strong electron–phonon coupling. Numerous calculations support this idea and have predicted transition temperatures in the range 50–235 kelvin for many hydrides⁷, but only a moderate T_c of 17 kelvin has been observed experimentally⁸. Here we investigate sulfur hydride⁹, where a T_c of 80 kelvin has been predicted¹⁰. We find that this system transforms to a metal at a pressure of approximately 90 gigapascals. On cooling, we see signatures of superconductivity: a sharp drop of the resistivity to zero and a decrease of the transition temperature with magnetic field, with magnetic susceptibility measurements confirming a T_c of 203 kelvin. Moreover, a pronounced isotope shift of T_c in sulfur deuteride is suggestive of an electron–phonon mechanism of superconductivity that is consistent with the Bardeen–Cooper–Schrieffer scenario. We argue that the phase responsible for high- T_c superconductivity in this system is likely to be H_3S , formed from H_2S by decomposition under pressure. These findings raise hope for the prospects for achieving room-temperature superconductivity in other hydrogen-based materials.

Рекорд $T_c=135$ К (Schilling, 1993) побит: теоретики (группа Т. Суй, 2014) предсказали новое вещество H_3S с $T_c\sim 200$ К. Это было подтверждено экспериментами (группа М. Еремца, 2015).

$$T_c = \frac{\omega_{\log}}{1.2} \exp \left[-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right]$$

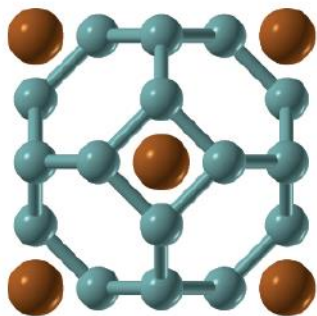
Связь сверхпроводимости и химии: гипотеза и тест на Ac-H и Th-H [Semenok & Oganov, *JPCL*, 2018] [Semenok & Oganov, *Curr. Opin. Solid State & Mater. Sci.*, 2020]



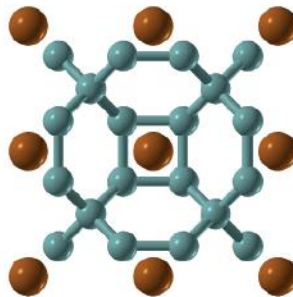
LaH₁₀: рекорд (260 K @ 190 ГПа) (Somayazulu et al., 2019).

Тест идеи: гидриды Th и Ac имеют высокую T_c.

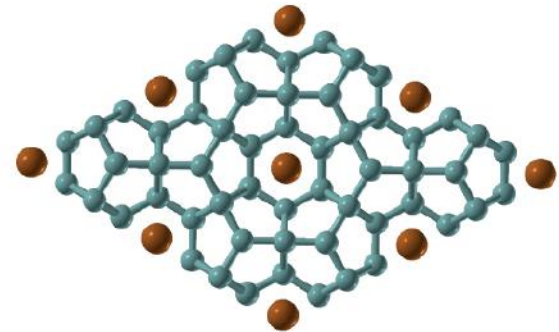
Атом металла ОЧЕНЬ важен!



CaH₆
(T_c = 220–235 K)



LaH₁₀ (T_c = 274–286 K) AcH₁₀ (T_c = 226–251 K)
YH₁₀ (T_c = 305–326 K) ThH₁₀ (T_c = 220–241 K)

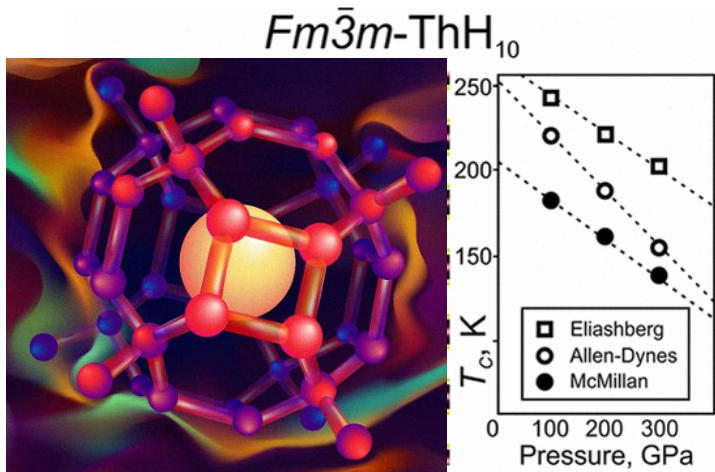


AcH₁₆
(T_c = 221–241 K)

Супергидрид тория ThH_{10} ($T_C = 159\text{-}161\text{ K}$) [Semenok et al., *Materials Today* 2020]

Соединение ThH_{10} было предсказано нами в 2018 году и уже через год синтезировано при 174 ГПа!

Теория при 174 ГПа дает $T_c=167\text{-}183\text{ K}$. Эксперимент: $T_c = 161\text{ K}$.



ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES

Research Article

High-Temperature Superconductivity in a Th-H System under Pressure Conditions

Alexander G. Kvashnin^{†‡}, Dmitrii V. Semenok^{†‡}, Ivan A. Kruglov[§], Izabela A. Wrona[¶], and Artem R. Oganov^{†§†}

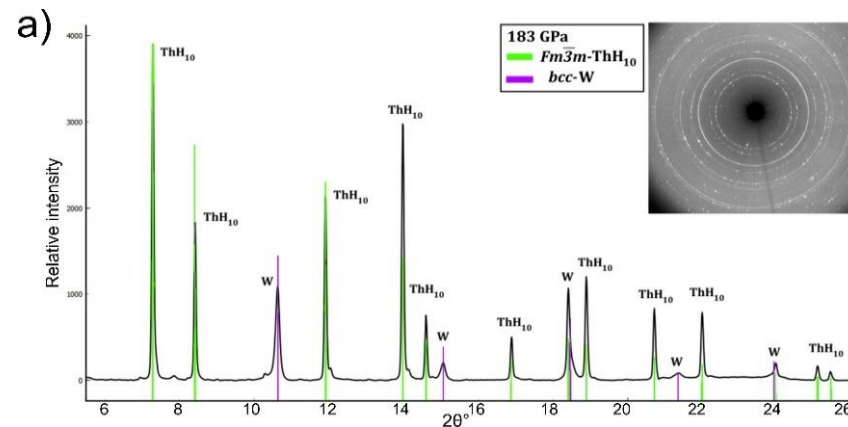
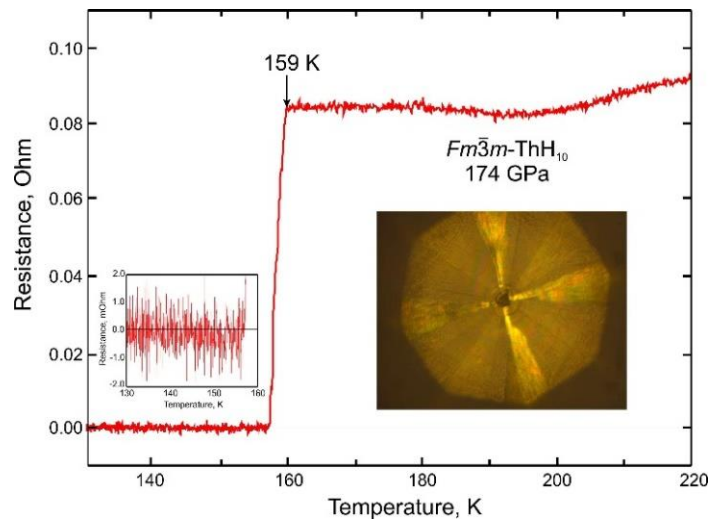
[†] Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo Innovation Center, 3 Nobel Street, Moscow 143026, Russia
[‡] Moscow Institute of Physics and Technology, 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny 141700, Russia
[§] Dukhov Research Institute of Automatics (VNIIA), Moscow 127055, Russia
[¶] Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Czestochowa, Armii Krajowej 13/15 Avenue, 42-200 Czestochowa, Poland
^{††} International Center for Materials Discovery, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China

ACS Appl. Mater. Interfaces, 2018, 10 (50), pp 43809–43816
 DOI: 10.1021/acsami.8b17100
 Publication Date (Web): December 4, 2018
 Copyright © 2018 American Chemical Society

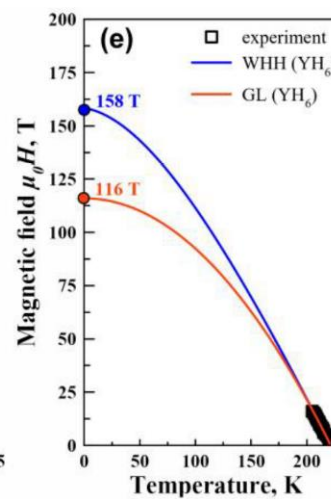
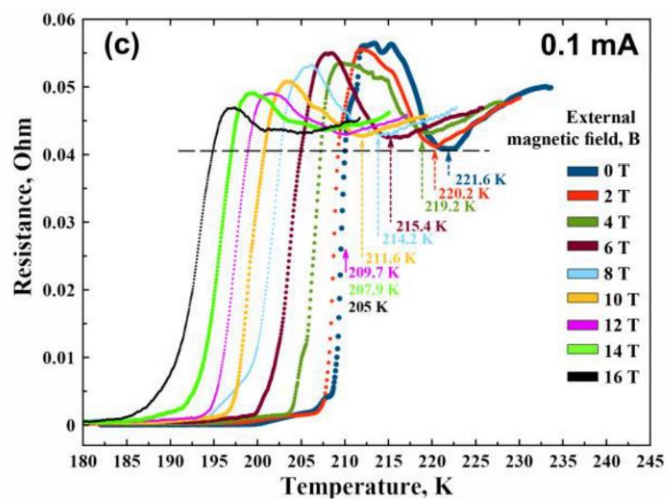
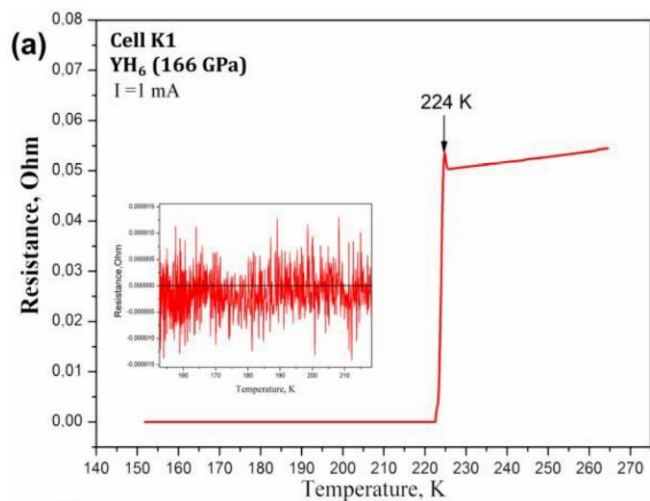
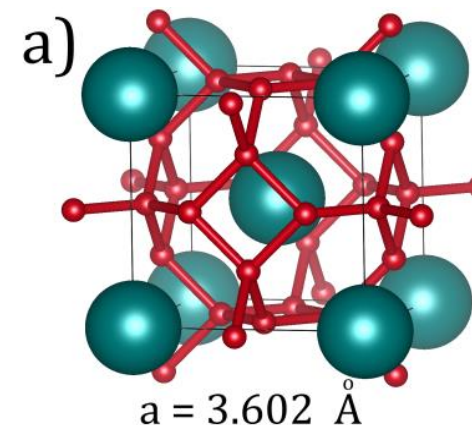
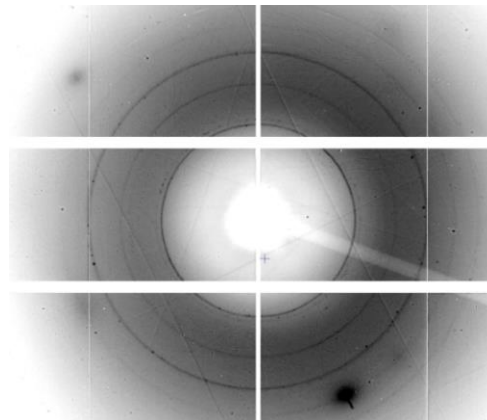
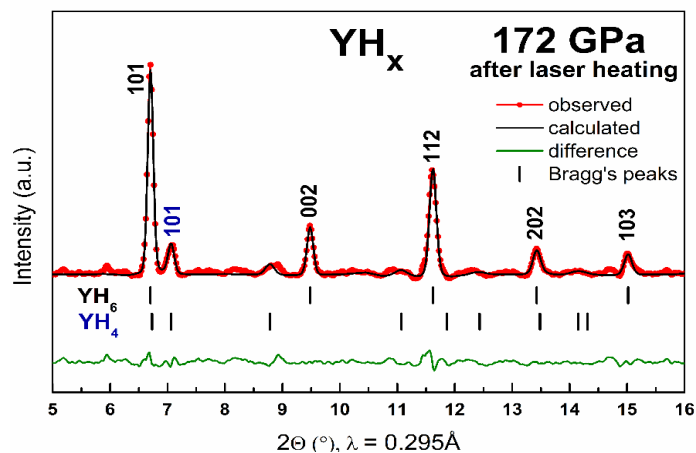
Cite this: ACS Appl. Mater. Interfaces 2018, 10, 50, 43809-43816

RIS Citation GO

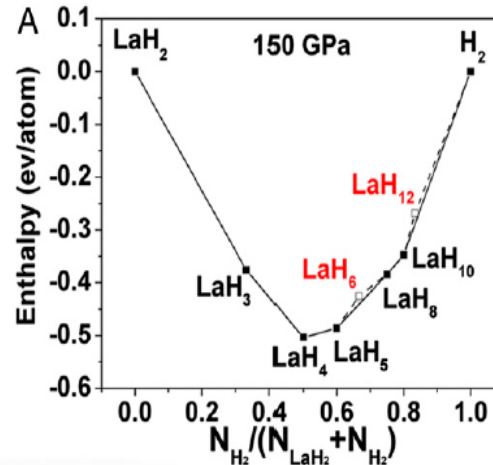
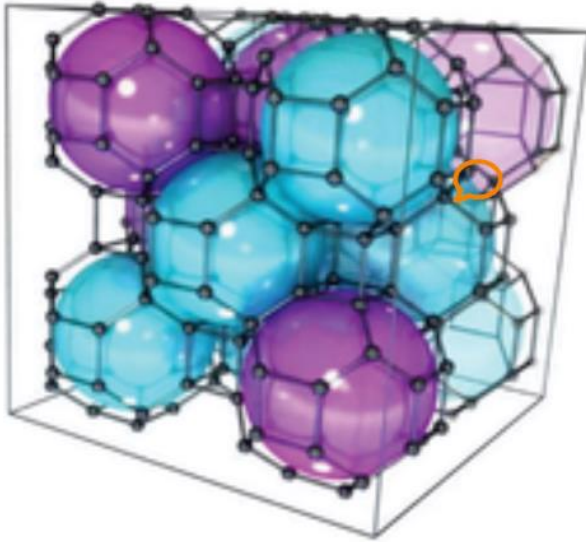
*E-mail: A.Kvashnin@skoltech.ru (A.G.K.), *E-mail: A.Oganov@skoltech.ru (A.R.O.)



Супергидрид иттрия YH_6 ($T_C = 224$ K) [Troyan et al., *Advanced Materials*, 2021]

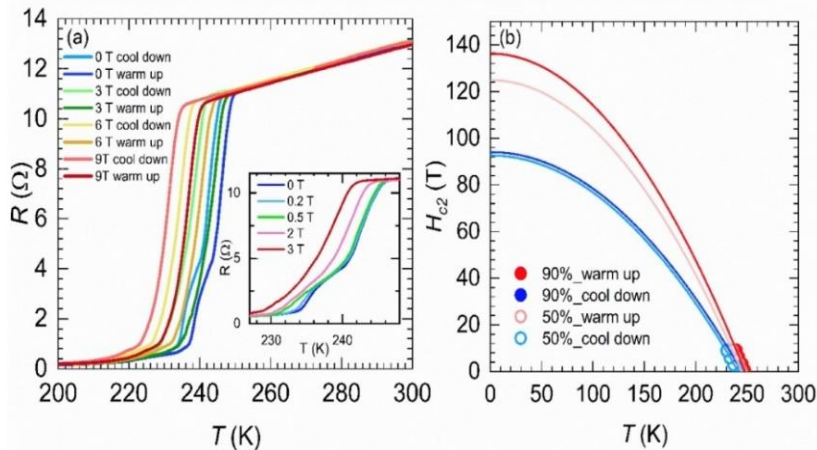


Текущий рекорд: LaH_{10} ($T_c = 250 \text{ K}$ при 170-180 ГПа)

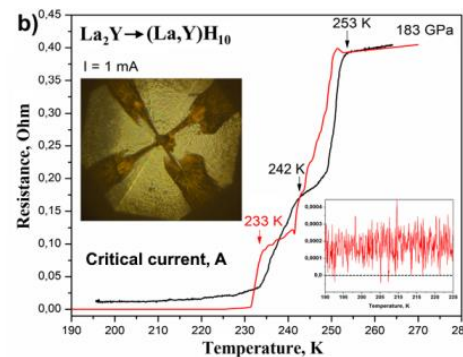
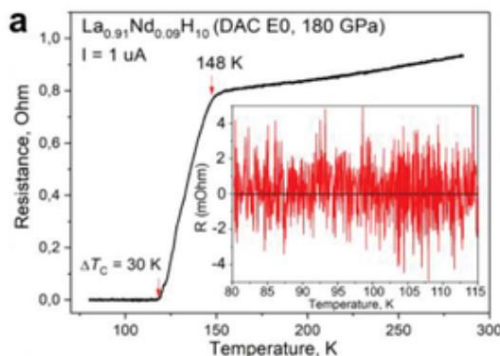


Предсказание LaH_{10} :
Liu et al. (PNAS 2017).

Синтез:
Geballe et al. (Ang. Chem. 2018)



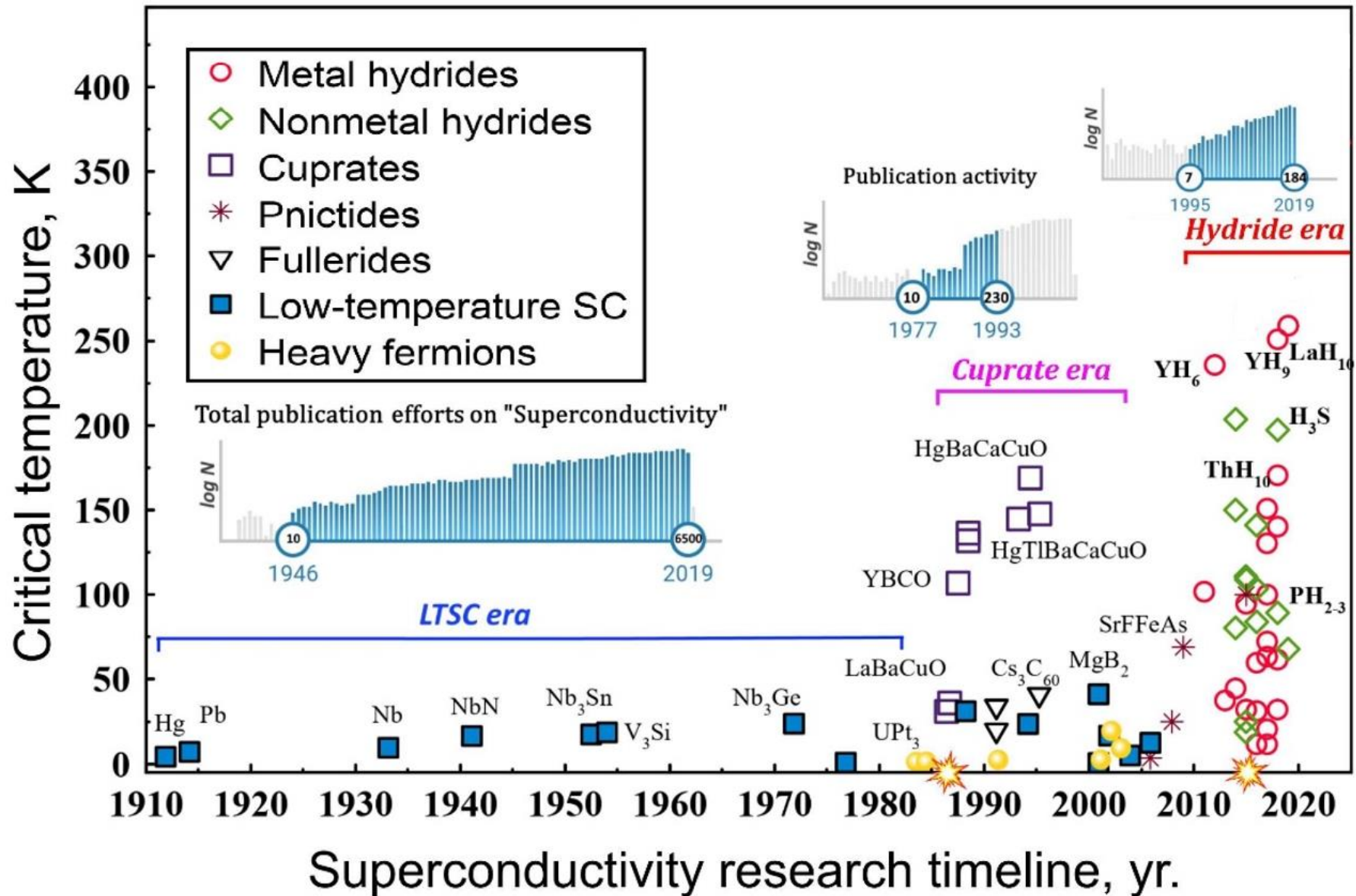
Измерение T_c :
Somayazulu et al. (PRL, 2019)
Drozdov et al. (Nature, 2019)



Допирование:

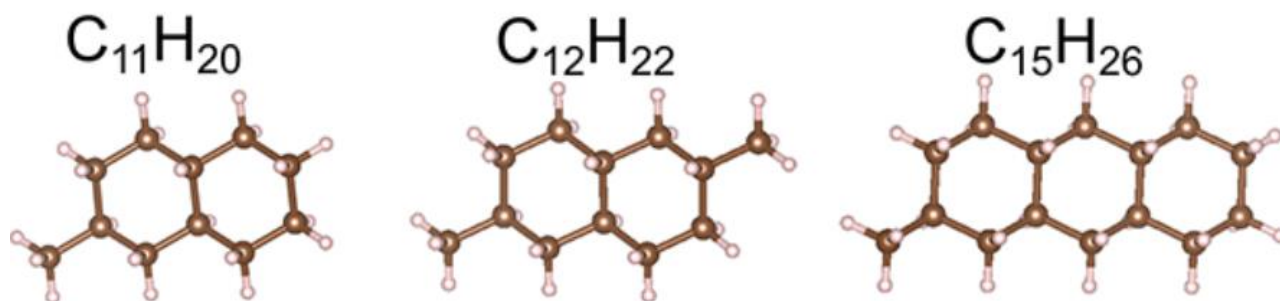
- Немагнитные примеси не влияют на T_c : для $(\text{La}_{0.67}\text{Y}_{0.33})\text{H}_{10}$ $T_c=253 \text{ K}$ (Semenok, Troyan, Oganov, *Adv. Mat.* 2021).
- Магнитные примеси подавляют сверхпроводимость: для $(\text{La}_{0.91}\text{Nd}_{0.09})\text{H}_{10}$ $T_c=148 \text{ K}$, для $>15\% \text{ Nd}$ $T_c=0 \text{ K}$ (Semenok, Troyan, Oganov, *Adv. Mat.* 2022).
- Это согласуется с теоремой Андерсона.

Бинарные гидриды подошли близко к комнатной сверхпроводимости. Надежда на тройные гидриды!

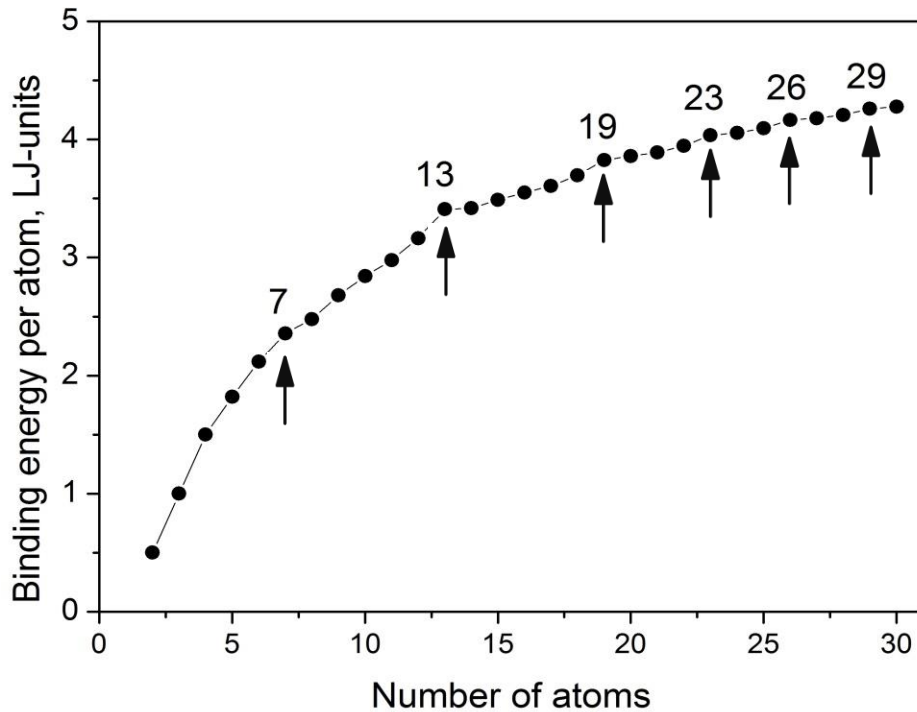


Какие наночастицы/молекулы наиболее вероятны?

Prediction of Stable Molecules is a Very Different Problem



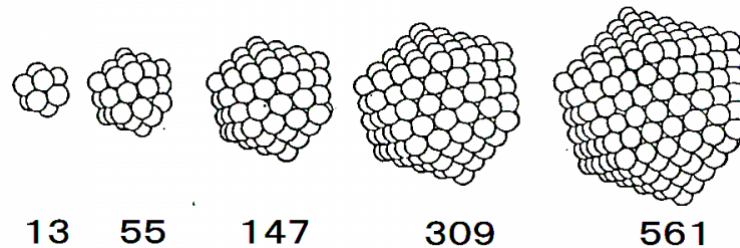
Стабильность наночастиц: условное понятие



Леннард-Джонсовские кластеры

$$v(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

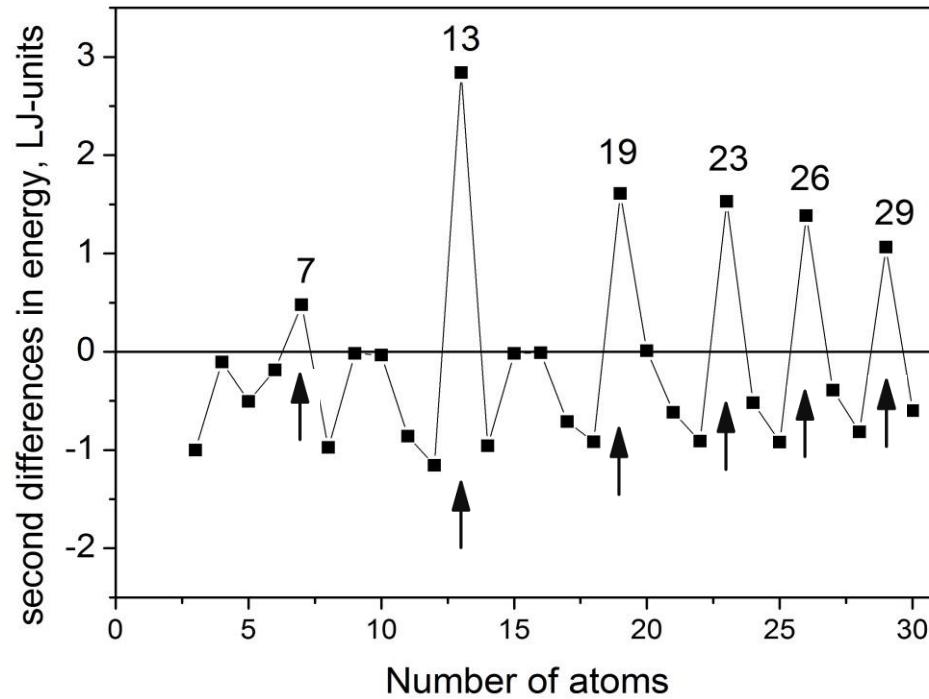
↑ — «магический» кластер



Стабильность растет с размером кластера. Мы определяем стабильность относительно соседних составов.

Особая стабильность связана с заполненными оболочками.

Стабильность наночастиц



↑ – магические кластеры

Критерий локальной стабильности

(магические кластеры):

$$\Delta^2 E = E(n+1) + E(n-1) - 2E(n) > 0$$

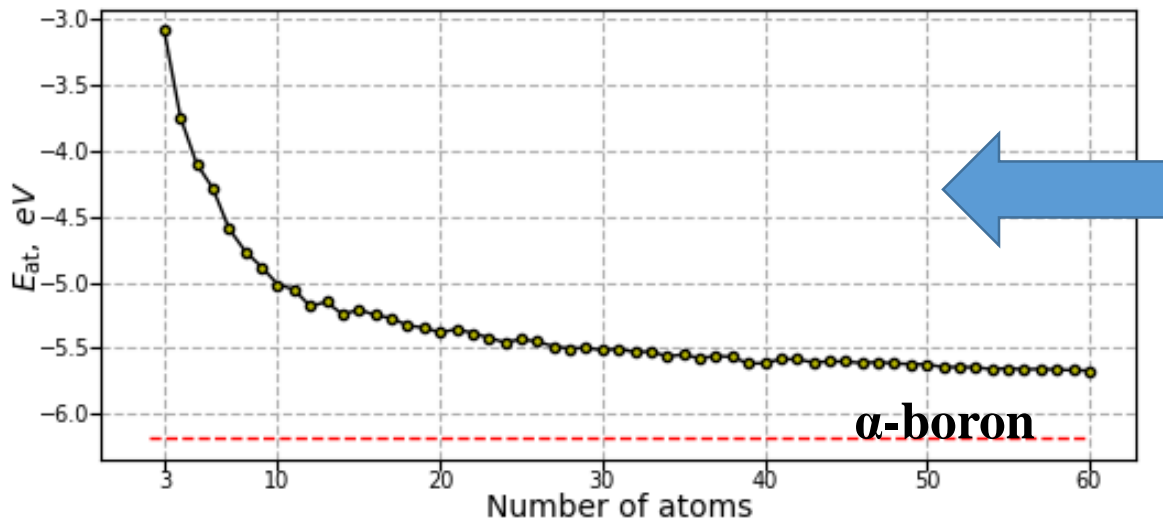
Для бинарных кластеров ($A_m B_n$):

$$\Delta_x^2 E = E(m, n+1) + E(m, n-1) - 2E(m, n) > 0$$

$$\Delta_y^2 E = E(m+1, n) + E(m-1, n) - 2E(m, n) > 0$$

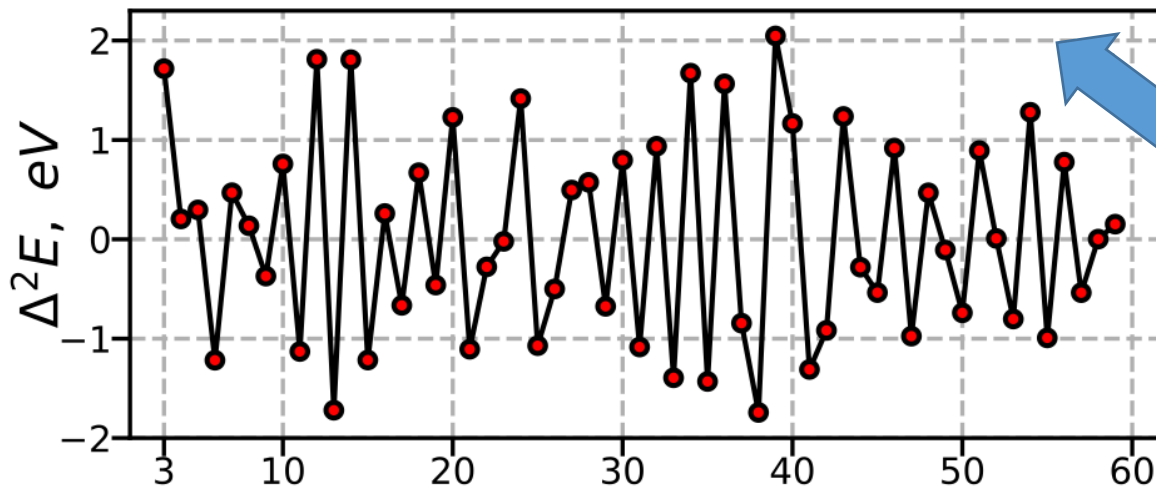
Stability of molecules does not follow from straight comparison of energies

Example of boron clusters (Anisimova & Oganov, submitted)



1. Energy falls almost monotonically with number of atoms.

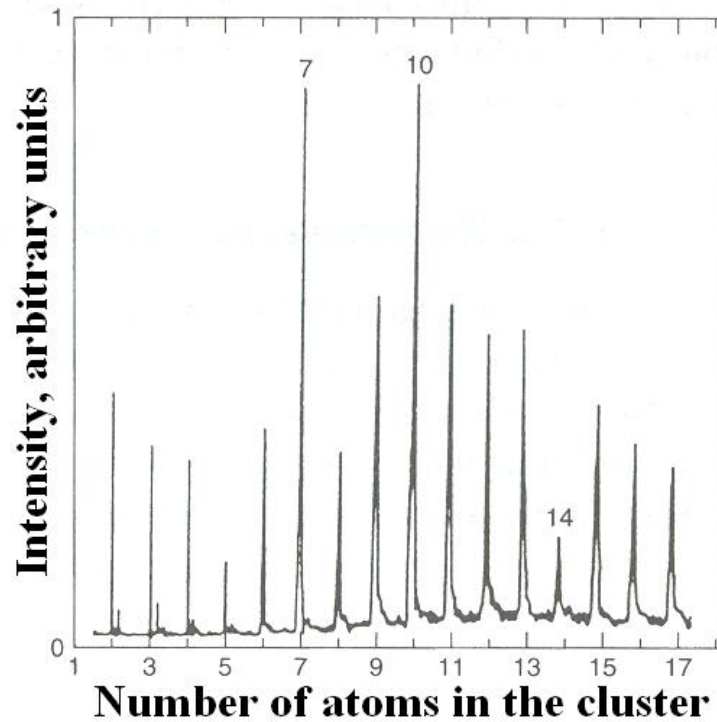
2. Infinite crystal always wins by energy.



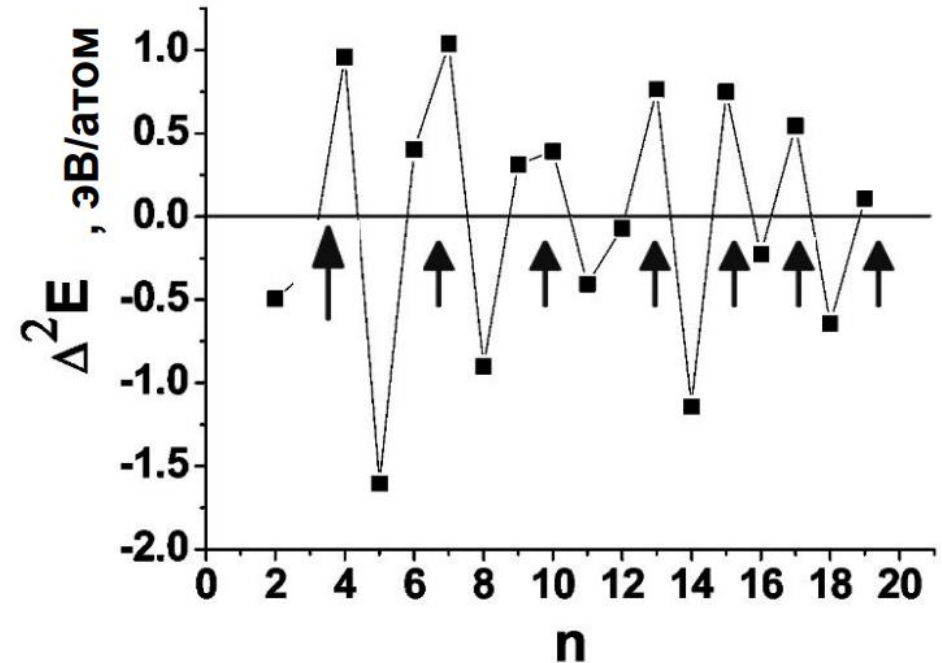
3. Correct comparison of energies – only with neighbor compositions.

4. $\Delta^2 E$ is a proper measure.

$\Delta^2 E > 0$ indicates the most abundant (“magic”) molecules



Mass-spectrum of Pb_n clusters
(Poole & Owens, 2003)



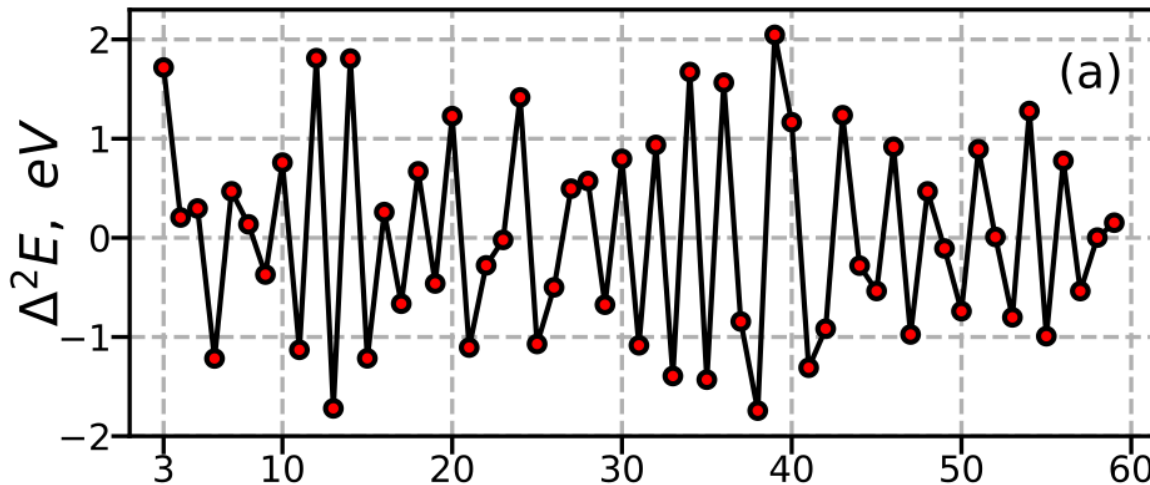
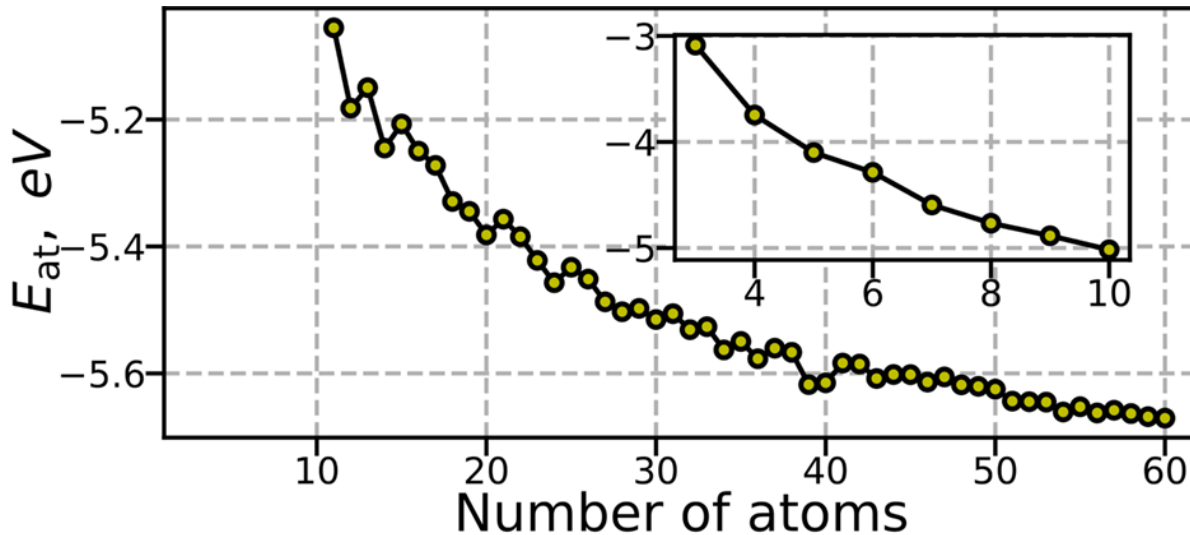
$\Delta^2 E$ for Pb_n clusters (Li et al., 2009)

↑ – “magic” cluster

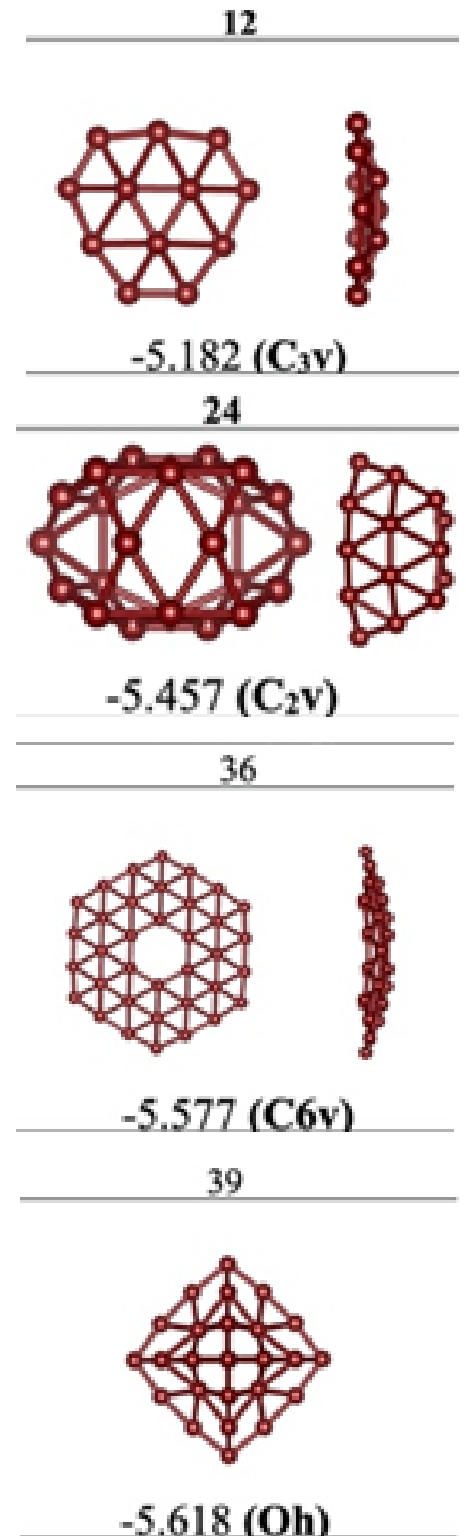
Binding energy grows with the size of cluster. We define stability relative to neighboring compositions. Stability is due to filled shells (electronic, atomic).

Let's look at pure elements: Boron

(Anisimova & Oganov, submitted)



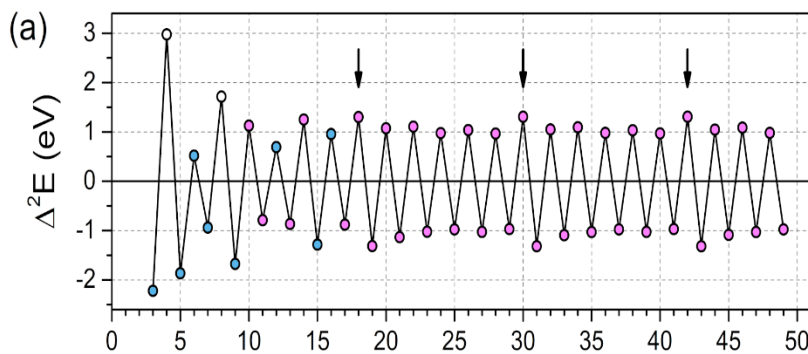
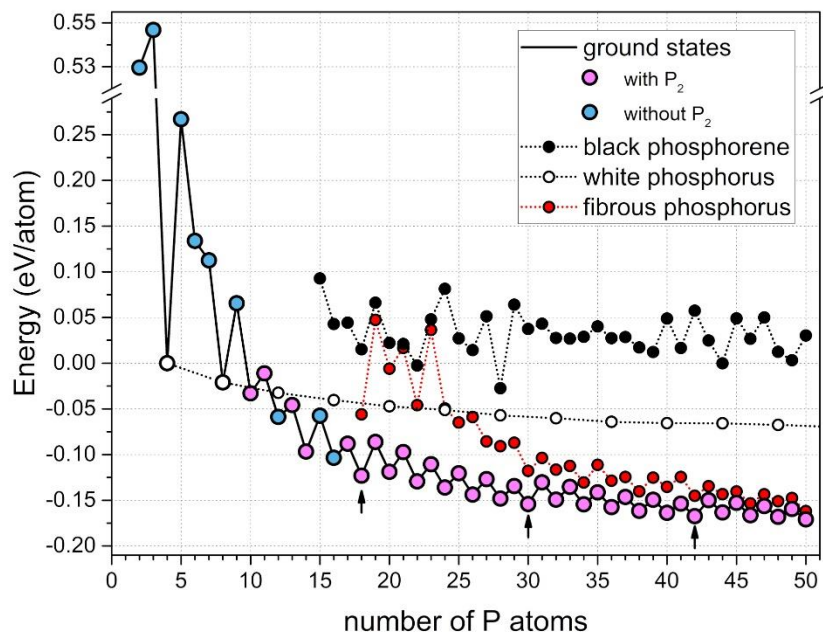
- Magic – mostly even clusters.
- Results similar to Wu et al. (2020), but often with lower energy



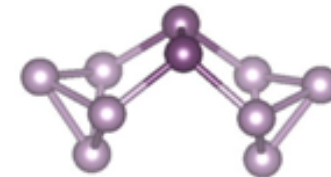
Let's look at pure elements: Phosphorus

(Rybkovskiy & Oganov, submitted)

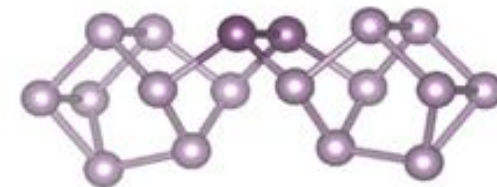
- Magic – ONLY even clusters (electronic).
 - Structural magic numbers $k = 18 + 12n$.
- One-dimensional quasiperiodic structures.



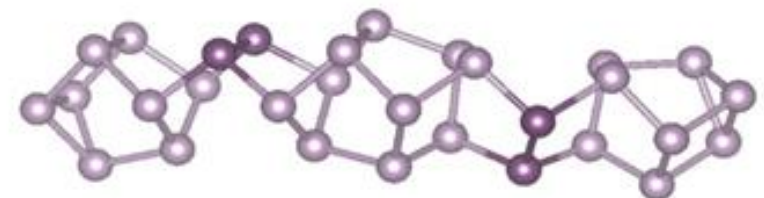
P_4



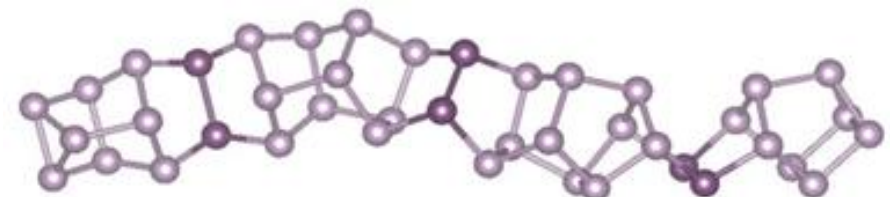
$P_{10} (P_4^*P_2P_4^*)$



$P_{18} (P_8^*P_2P_8^*)$



$P_{30} (P_8^*P_2P_{10}P_2P_8^*)$

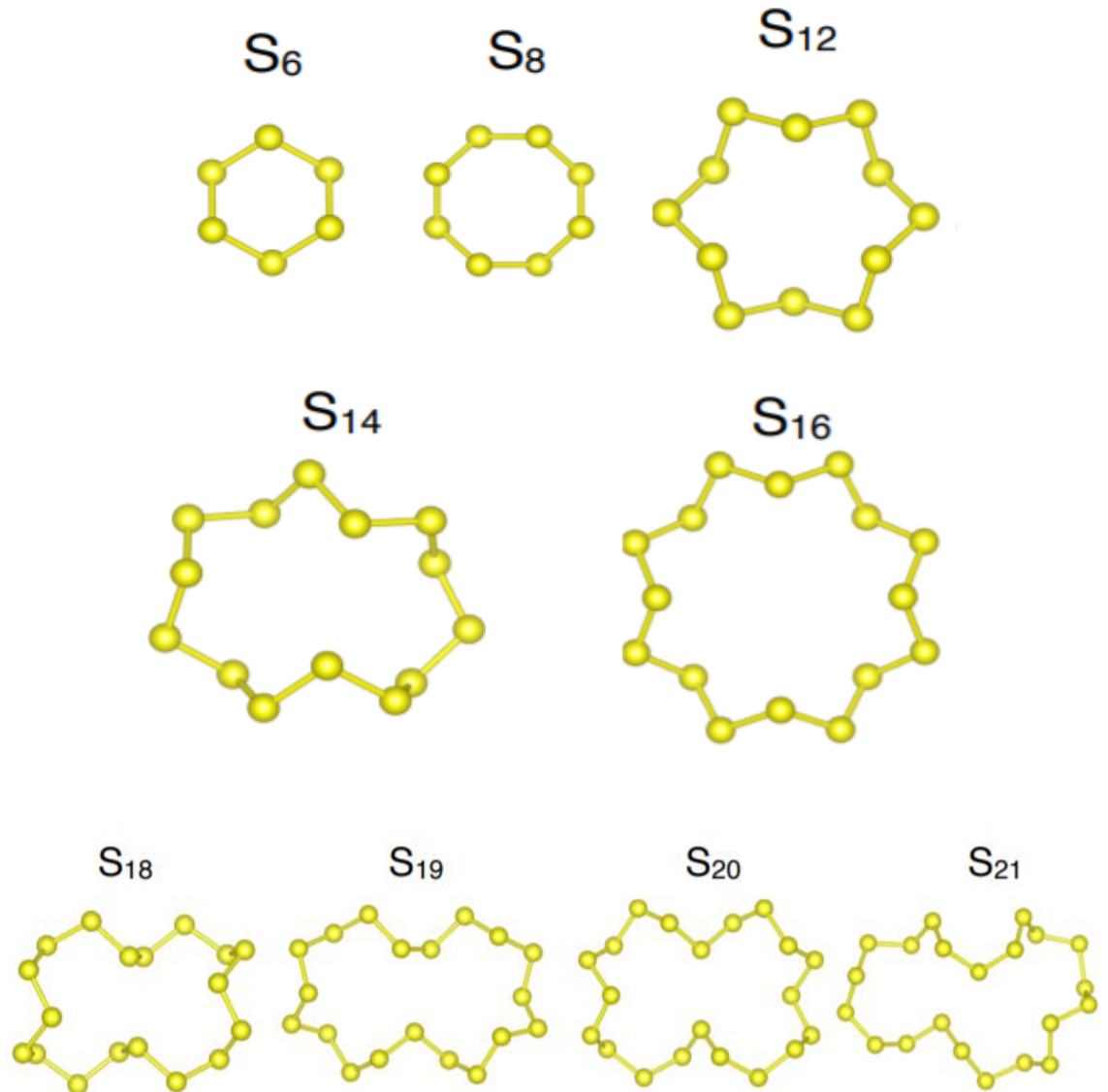
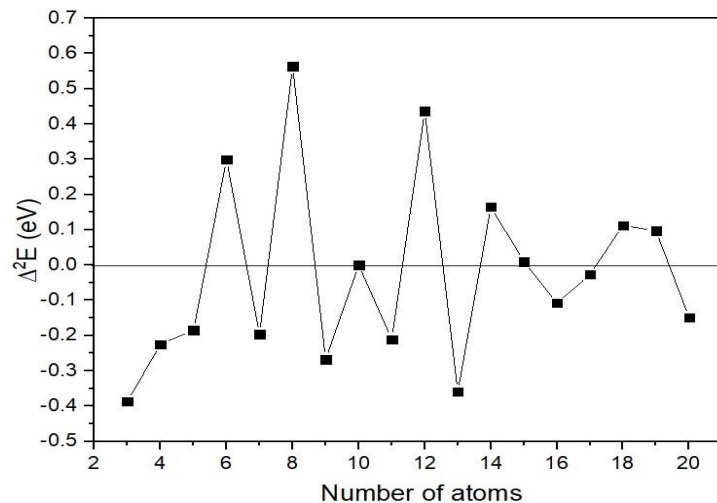
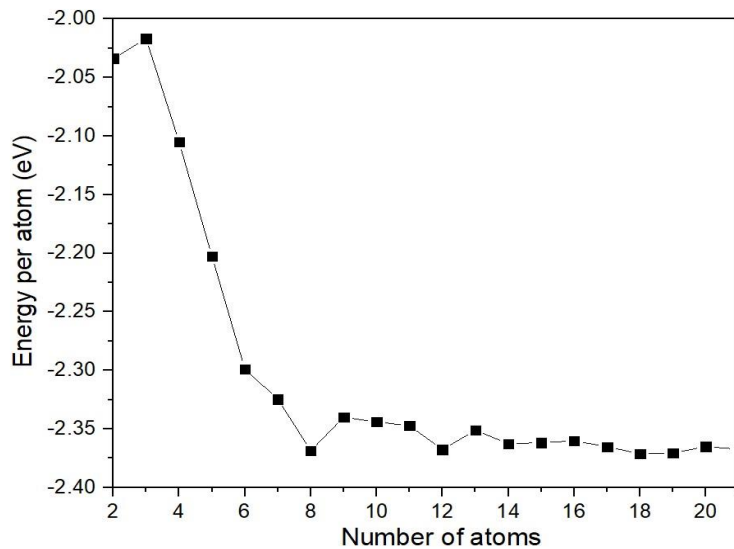


$P_{42} (P_8^*P_2P_{10}P_2P_{10}P_2P_8^*)$

Let's look at pure elements: Sulfur

(Fedyaeva & Oganov, submitted.)

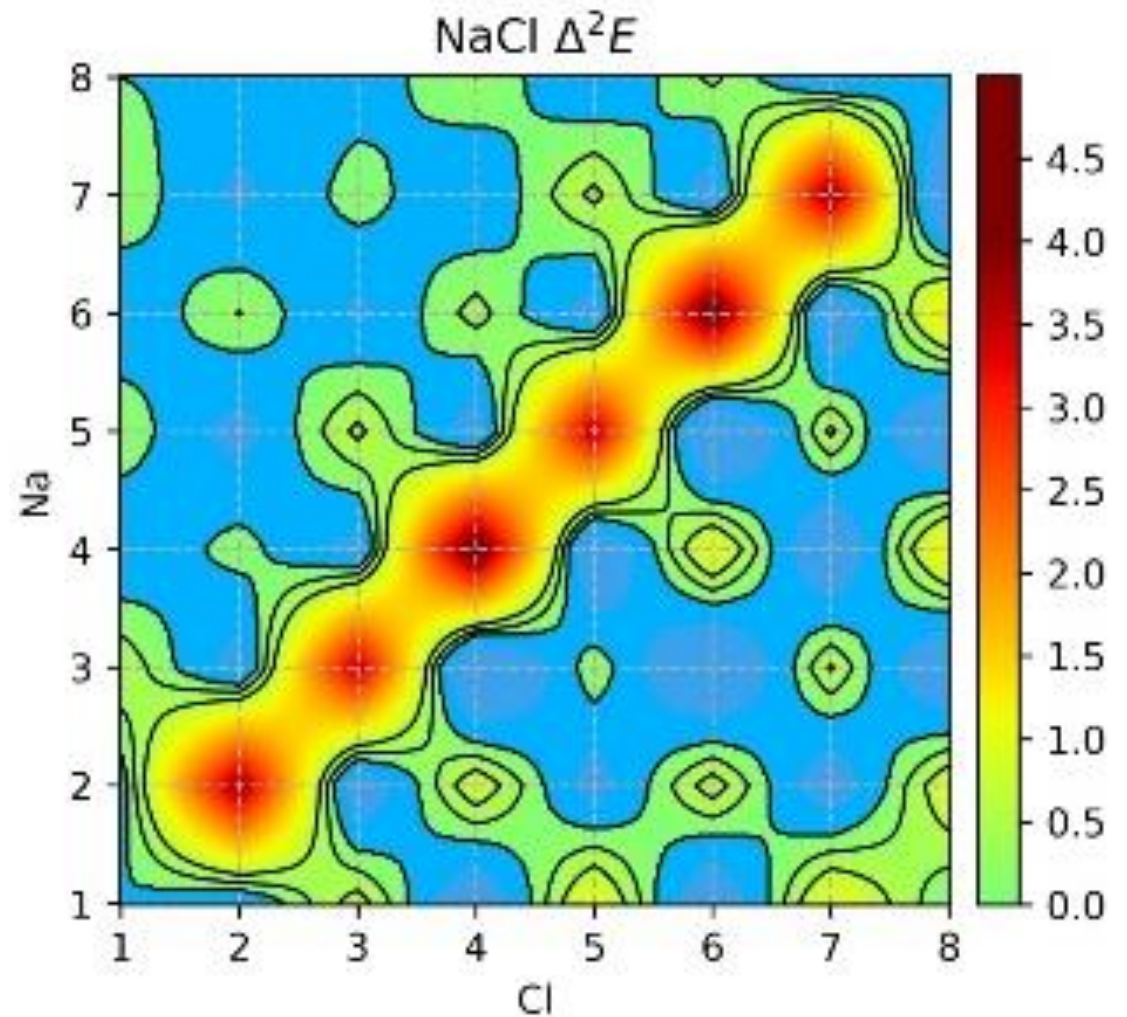
- Magic – mostly even clusters (structural).
- Starting from S_5 , ring structures evolving towards spiral chains.
- S_8 is special.



Predicting stable Na-Cl molecules

$(\text{NaCl})_n$ ridge of stability.

Numerous minor islands of stability.

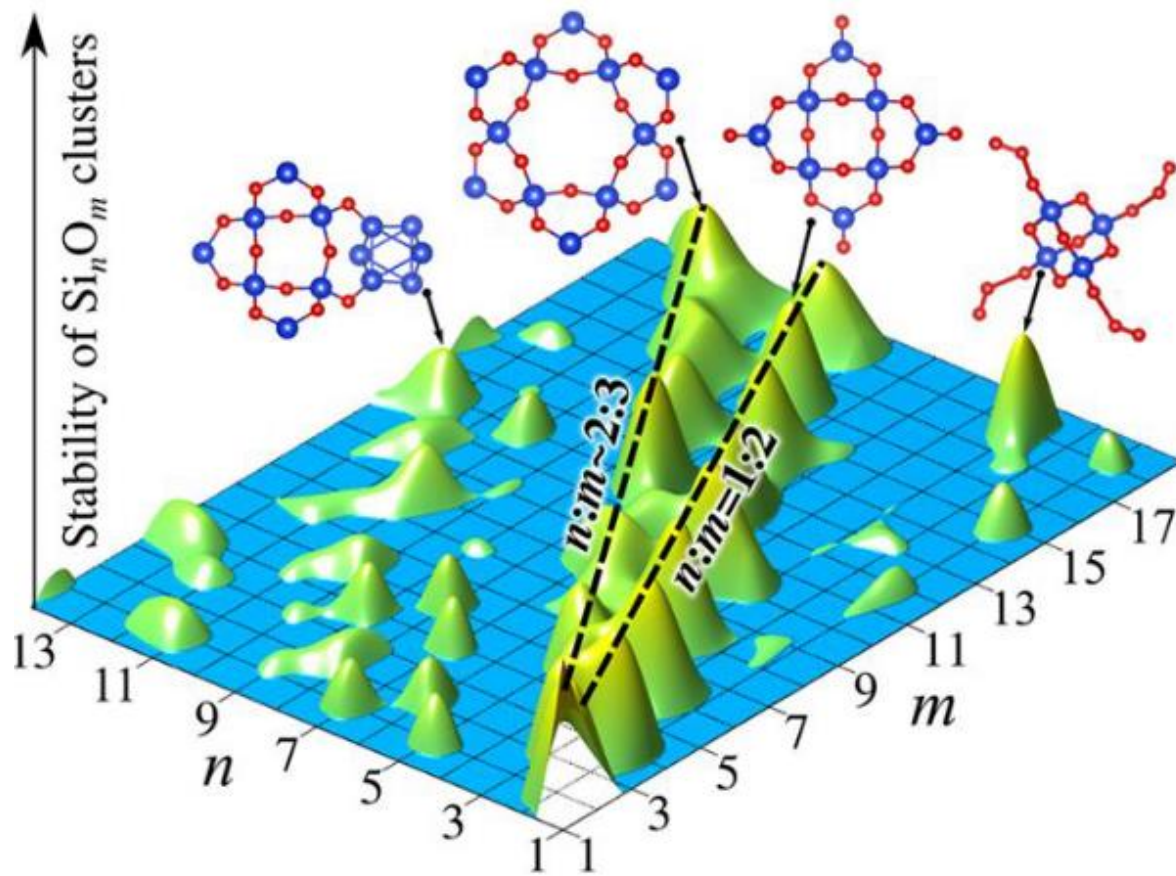


(result of M. Fedyaeva and S.V. Lepeshkin)

Map of stability of Si-O clusters

[Lepeshkin & Oganov, *J. Phys. Chem. Lett.* 2019]

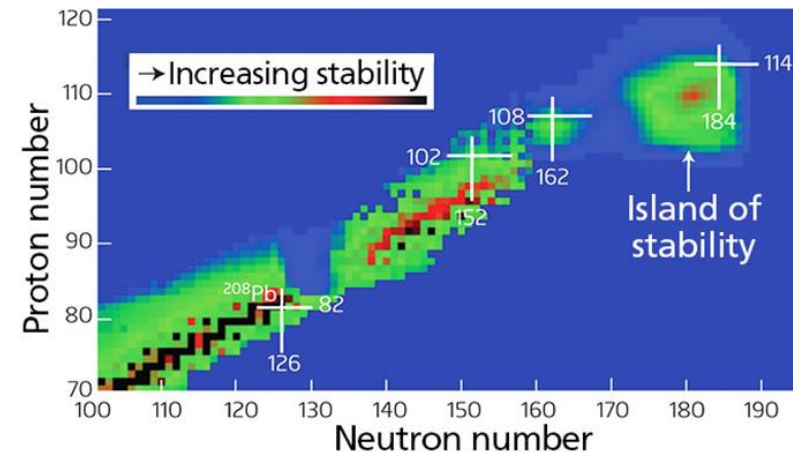
Si-O



Ridges of stability: SiO₂, Si₂O₃
Islands of stability: e.g., Si₄O₁₈

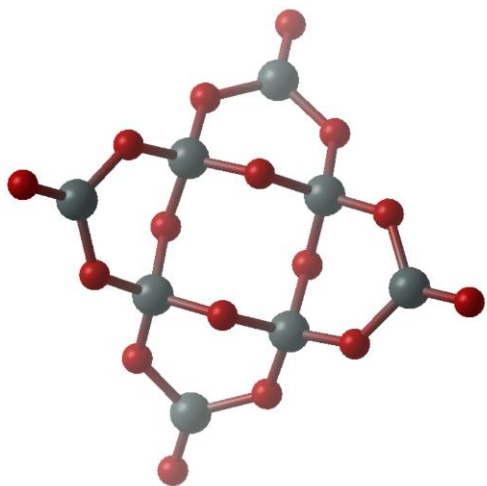
«Magic» nuclei: with filled proton or neutron shells (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 p or n)
 (1s²/2p⁶/3d¹⁰2s²/4f⁸/4f⁶3p⁶5g¹⁰/5g⁸4d¹⁰3s²6h¹²)

Magic numbers of electrons = 2, 10, 18, 36, 54, 86, 118)

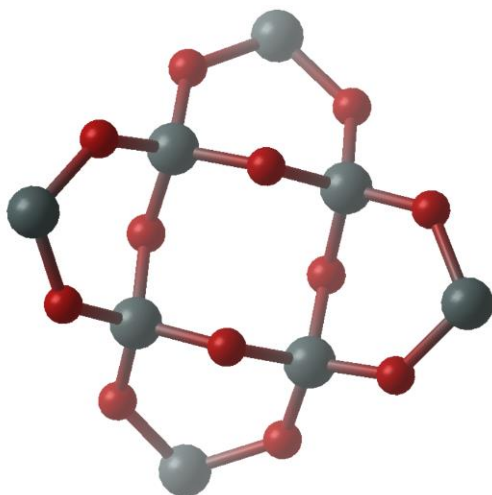


Analogy with magic atomic nuclei

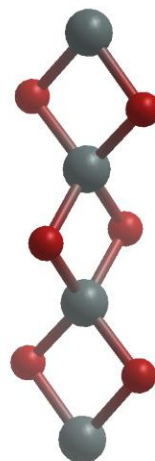
Si-O



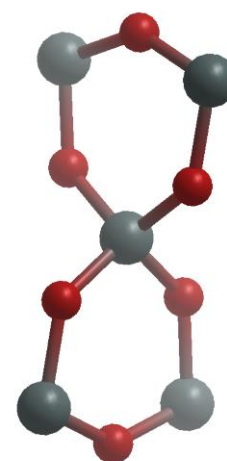
Si_8O_{16}



Si_8O_{12}

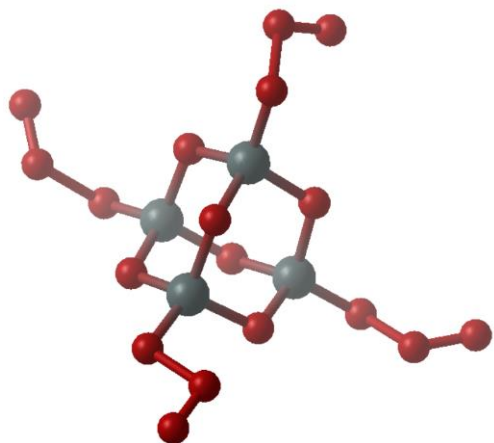


Si_4O_6

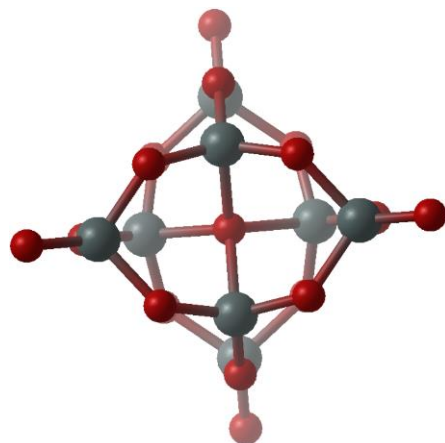


Si_5O_6

Magic clusters. Non-magnetic

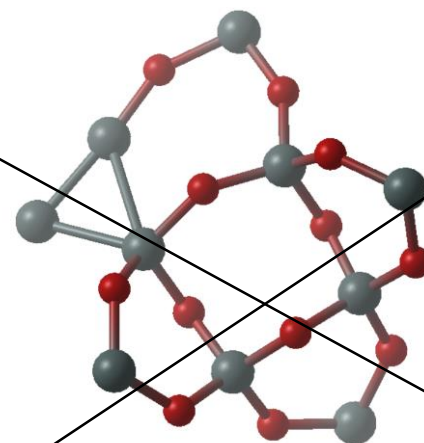


Si_4O_{18}



Si_8O_{17}

Magic magnetic(!) clusters. Excess of O

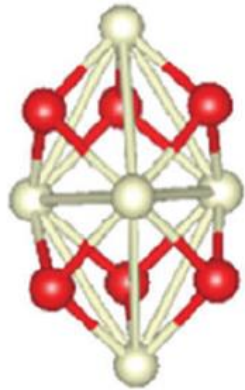


$\text{Si}_{10}\text{O}_{12}$

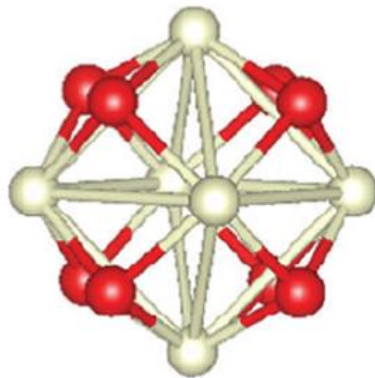
Unstable

Unusual compositions of transition metal oxide clusters

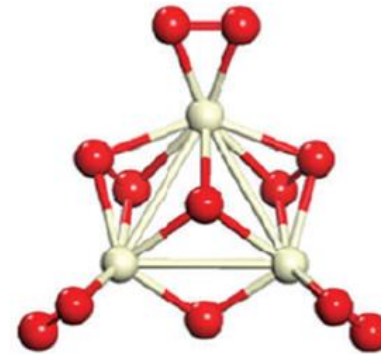
[Yu & Oganov, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018]



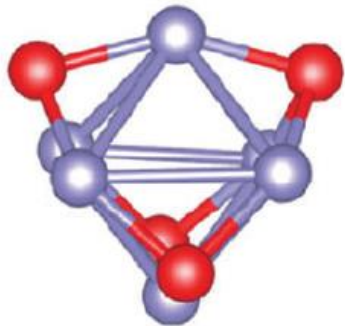
Ce_5O_6 (D_{3h} , 5A_1)



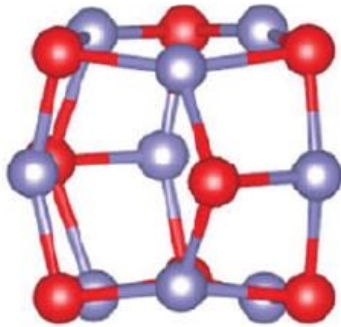
Ce_6O_8 (O_h , $^7A_{1g}$)



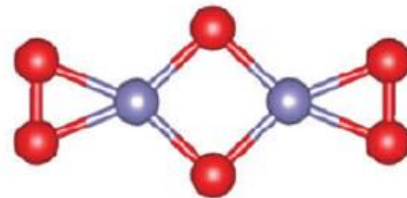
Ce_3O_{12} (C_s , $^3A'$)



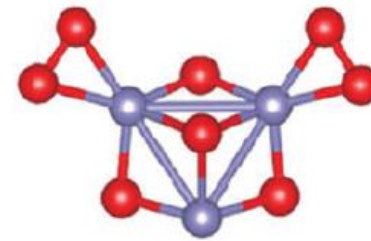
Fe_6O_4 (T_d , 1A_1)



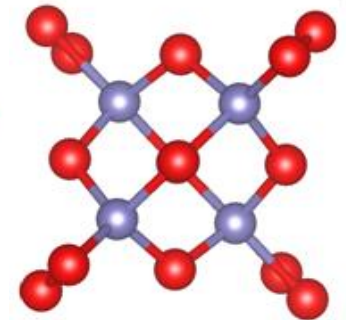
Fe_9O_8 (C_s , $^5A'$)



Fe_2O_8 (C_{2v} , 1A_2)



Fe_3O_8 (C_s , $^3A'$)



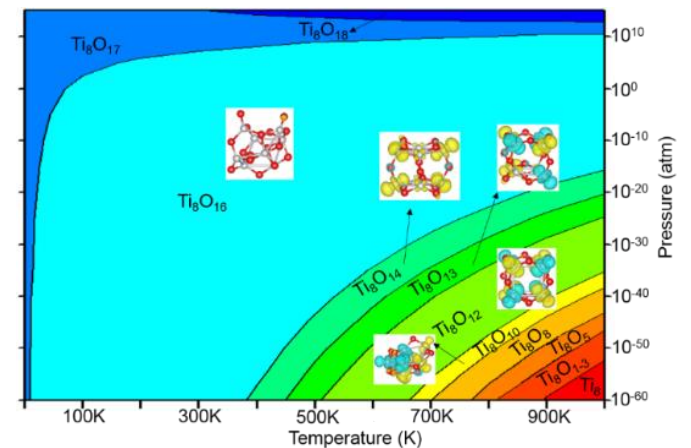
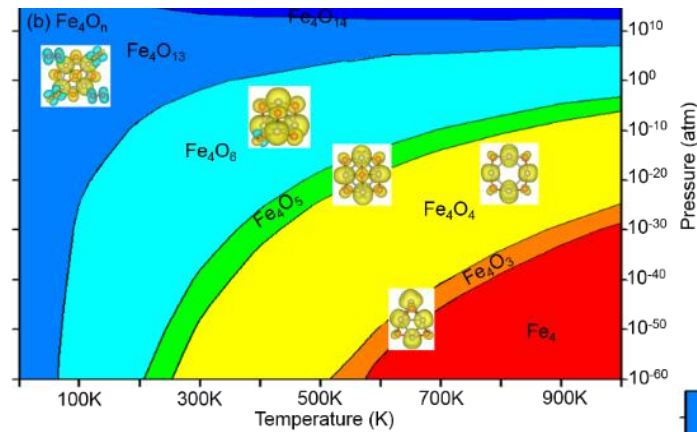
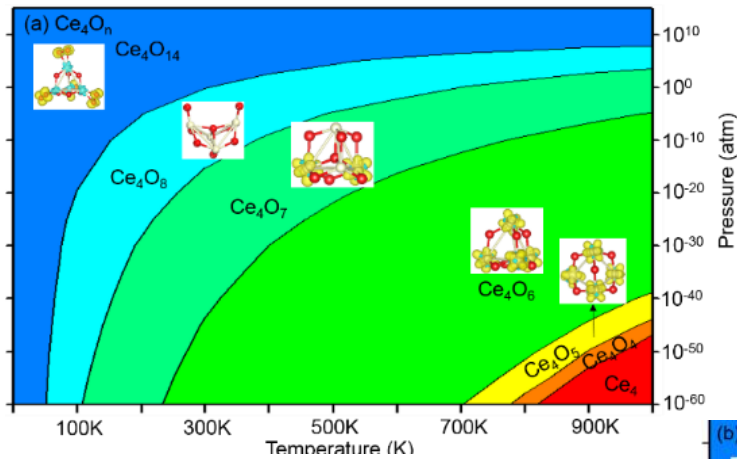
Fe_4O_{14} (D_{2d} , 1A)

Do crystals grow from such particles (“inorganic synthons”)?

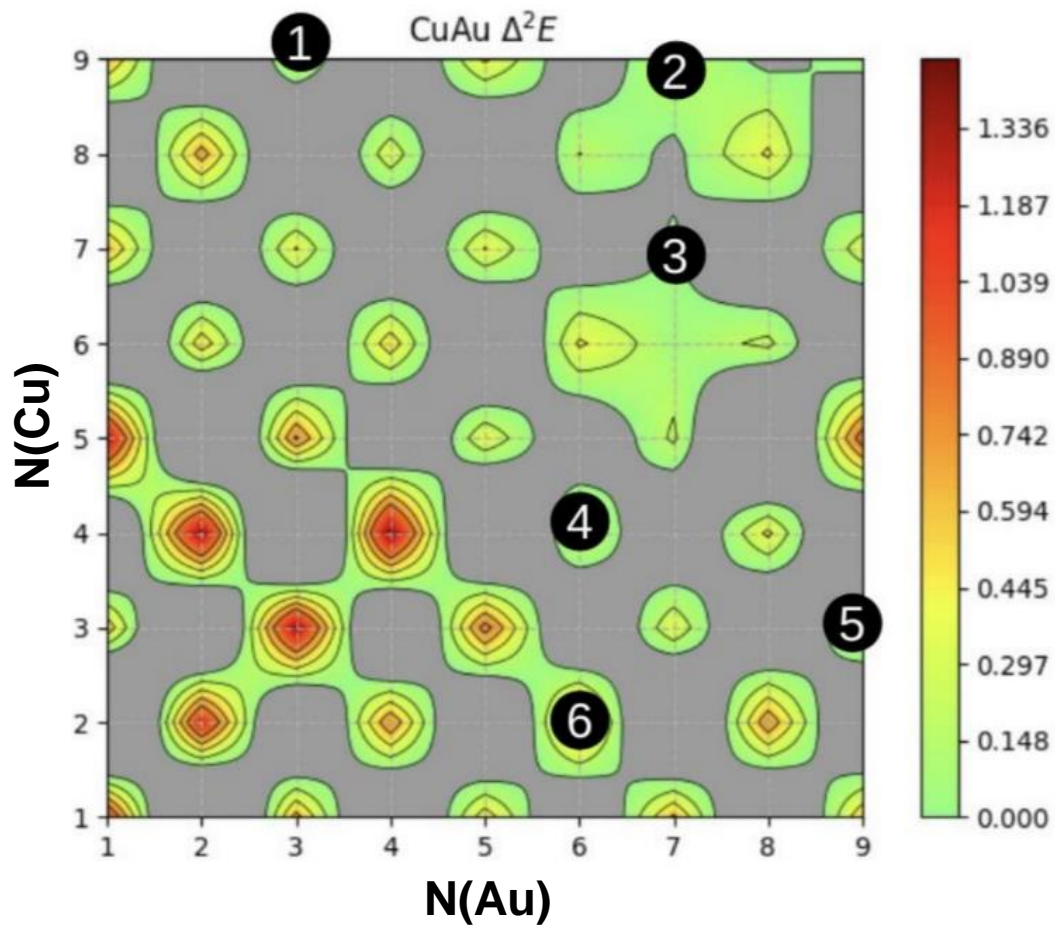
“Phase diagrams” of oxide clusters.

Example of Ce_6O_n , Fe_4O_n , Ti_8O_n clusters.

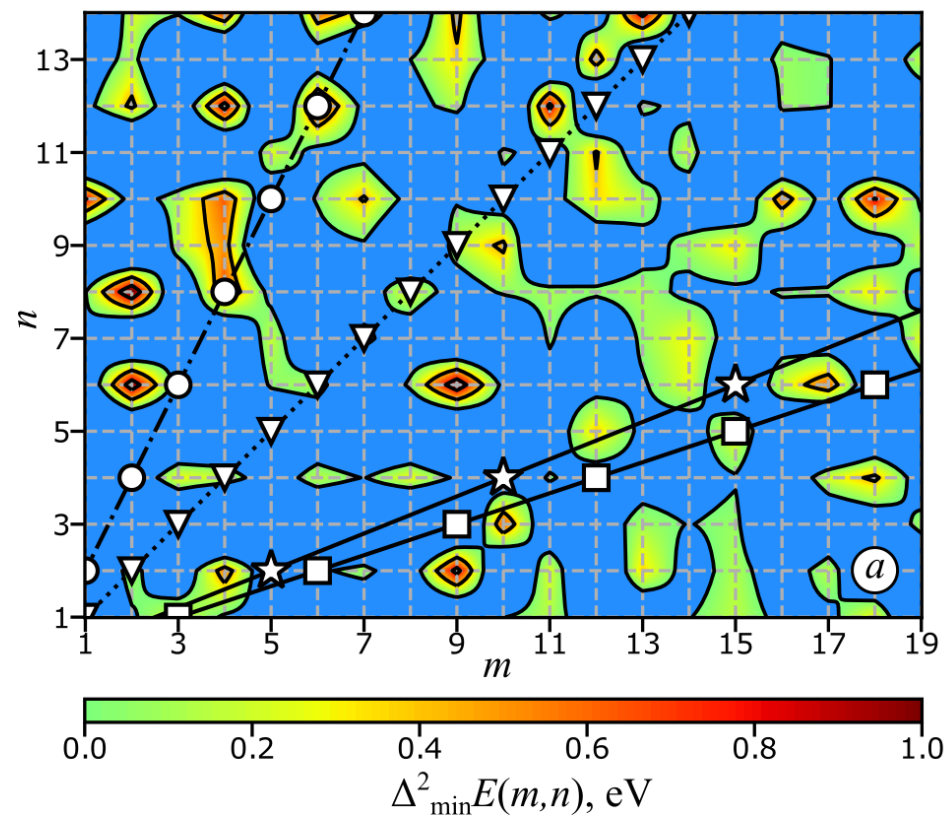
[Yu & Oganov, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018]



New tool: map of stability of molecules



Map of stability of Cu-Au clusters
(result of A. Mikhaylova).



Map of stability of Pd_mBi_n clusters
(Sandu et al., PCCP, 2021)

Why is organic chemistry so diverse?

(Lepeshkin & Oganov, *J. Phys. Chem. Lett.* 2022)

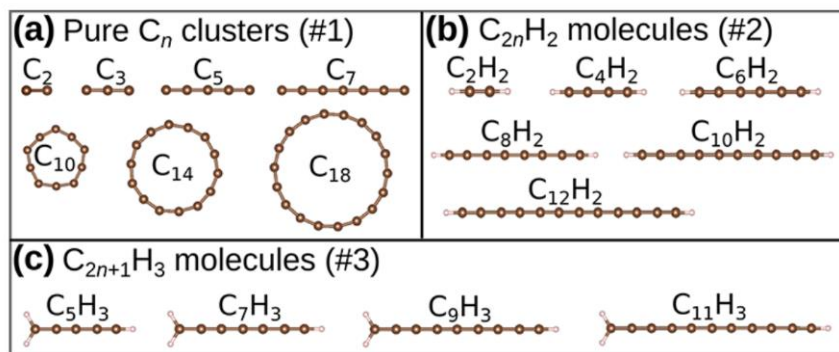
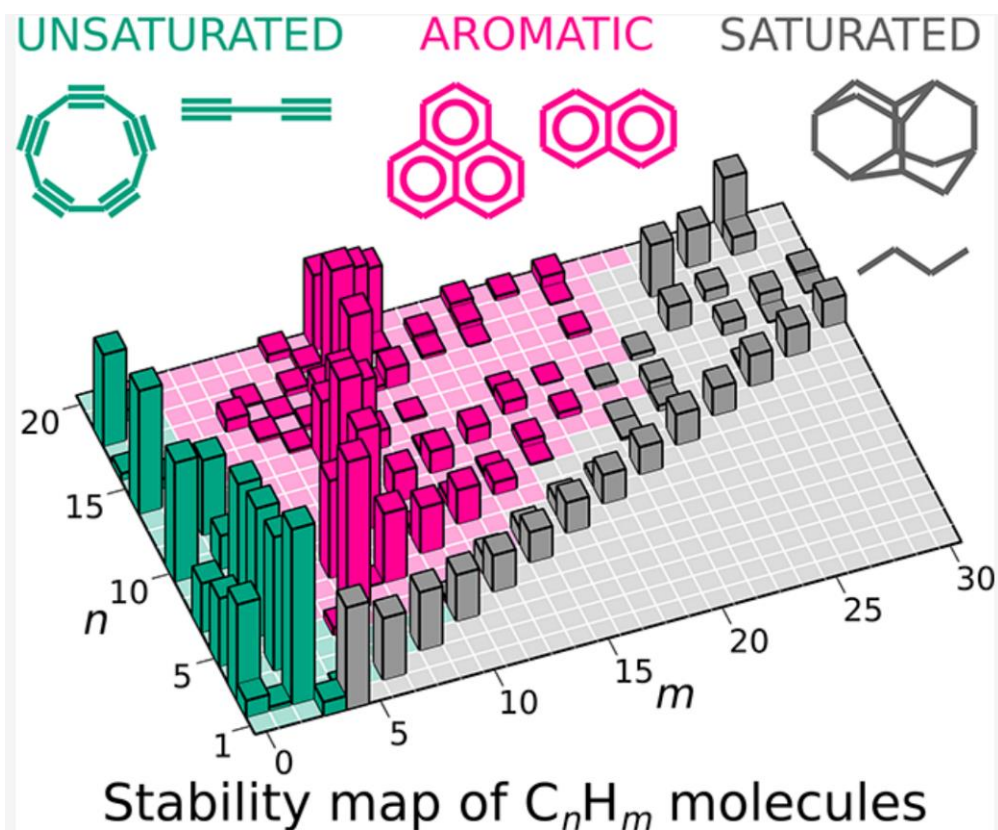


Figure 3. Structures of magic (poly)unsaturated HCs.

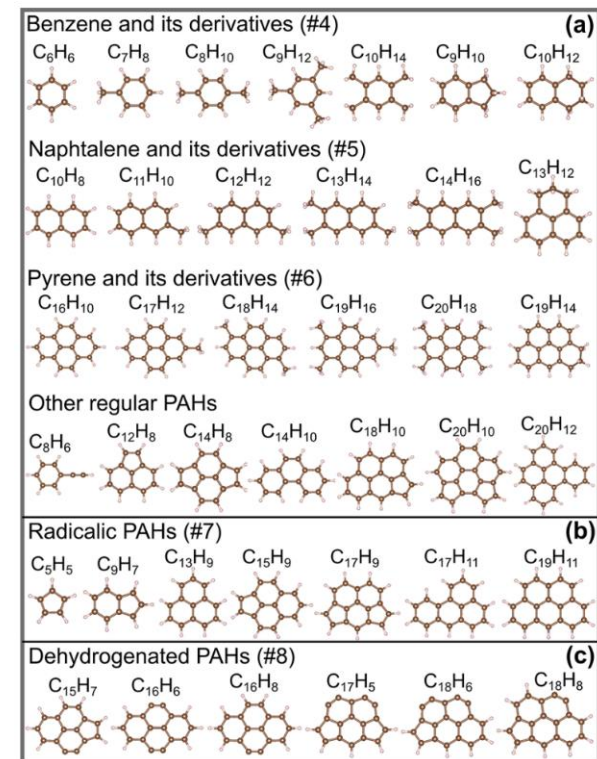


Figure 4. Structures of magic (poly)aromatic HCs.

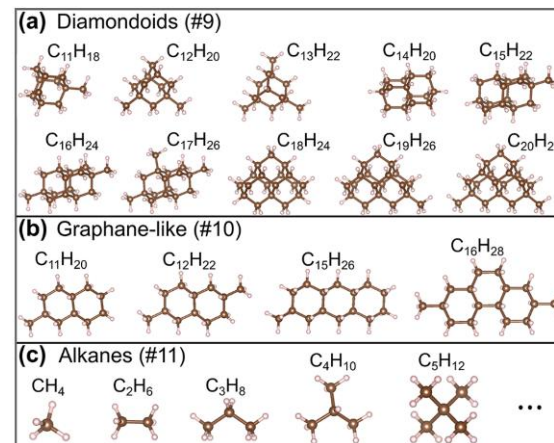


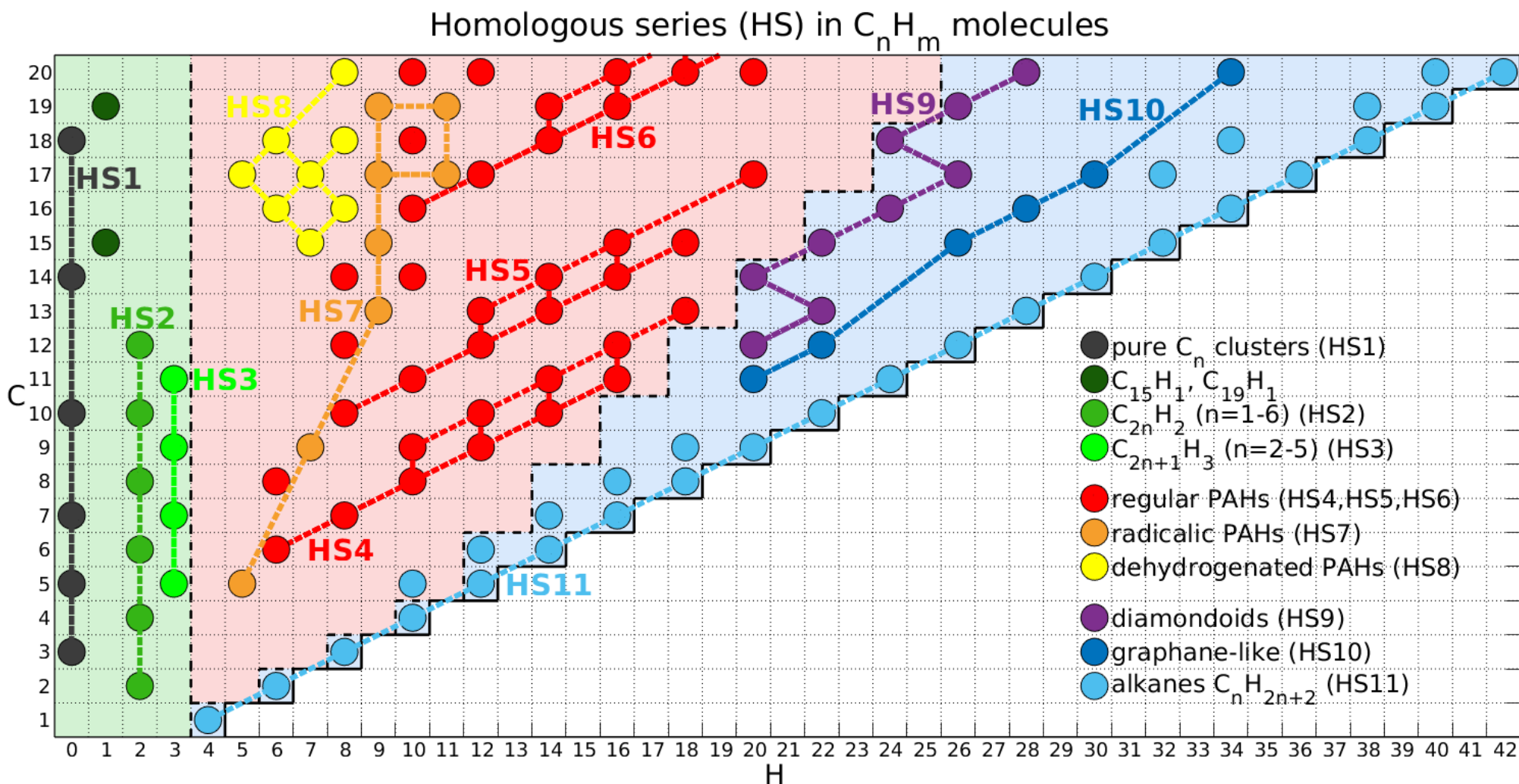
Figure 5. Structures of magic saturated HCs.

Which hydrocarbons are stable?

(Lepeshkin & Oganov, *J. Phys. Chem. Lett.* 2022)

-Homologous series: alkanes etc.

-Huge diversity, explaining the diversity of organic chemistry.



Предсказание материалов с сочетанием свойств

Пример термоэлектрических материалов

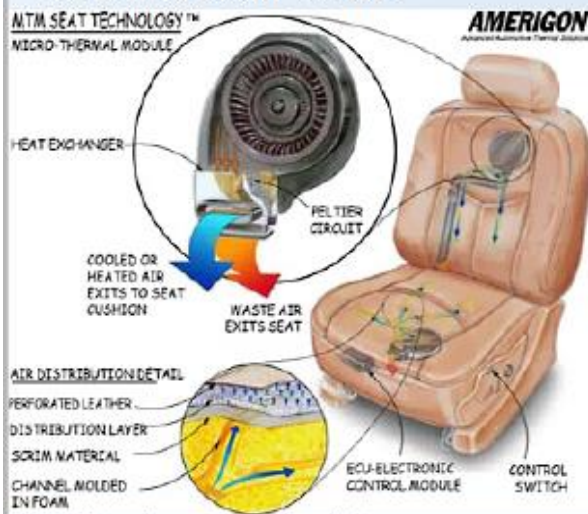
Applications

Water/Beer/Wine Cooler



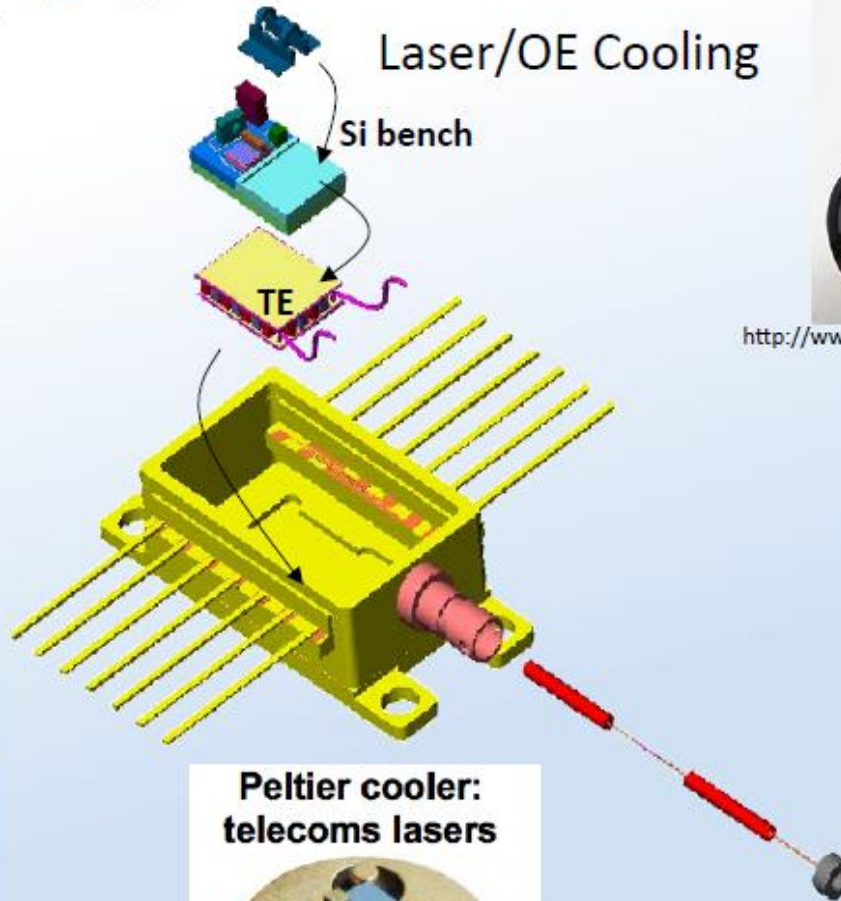
www.kingsbottle.com

Cooled Car Seat



http://wardsauto.com/ar/cooled_seats_mpg

Laser/OE Cooling



Peltier cooler:
telecoms lasers



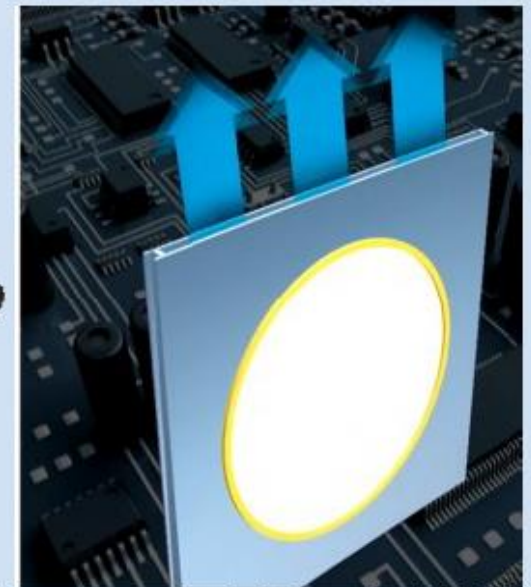
Copyright Micropelt

Cryogenic IR Night Vision



<http://www.x20.org/products/pv400-used-night-vision-scope/>

Electronic Cooling



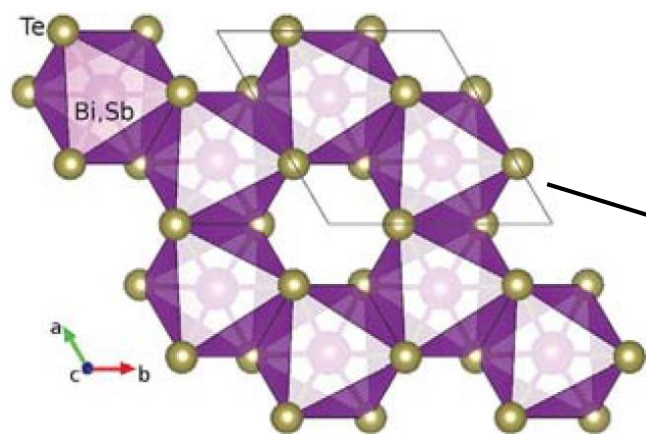
<http://www.gizmag.com/ge-dual-piezo-cooling-jet/25447/>

Многокритериальная оптимизация (Парето) находит новую термоэлектрическую модификацию Bi_2Te_3

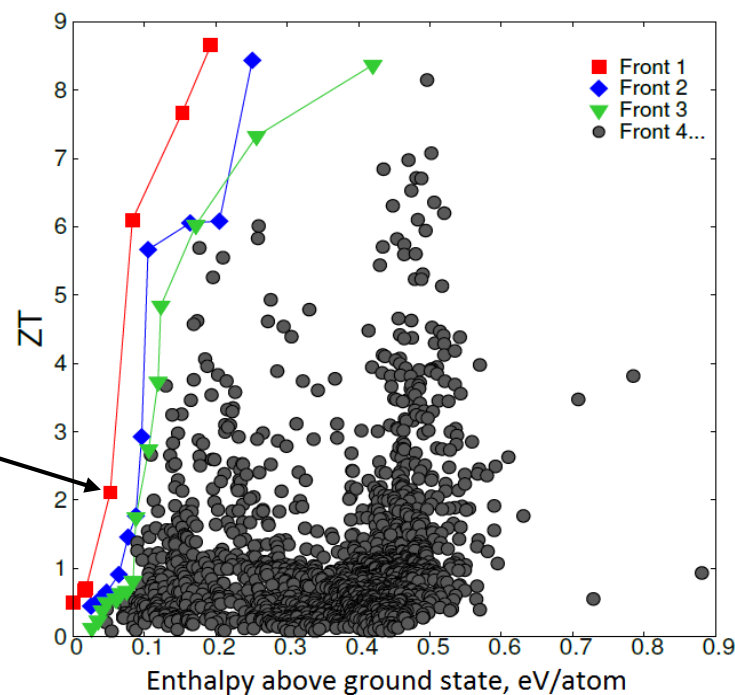
Computer Physics Communications 222 (2018) 152–157

Efficient technique for computational design of thermoelectric materials

Maribel Núñez-Valdez, Zahed Allahyari, Tao Fan, Artem R. Oganov



Предсказанная $R\bar{6}_3cm$ структура Bi_2Te_3



Парето-оптимизация ZT и стабильности в системе Bi-Te

Похожие выводы другой группы

Journal of
Materials Chemistry C



PAPER

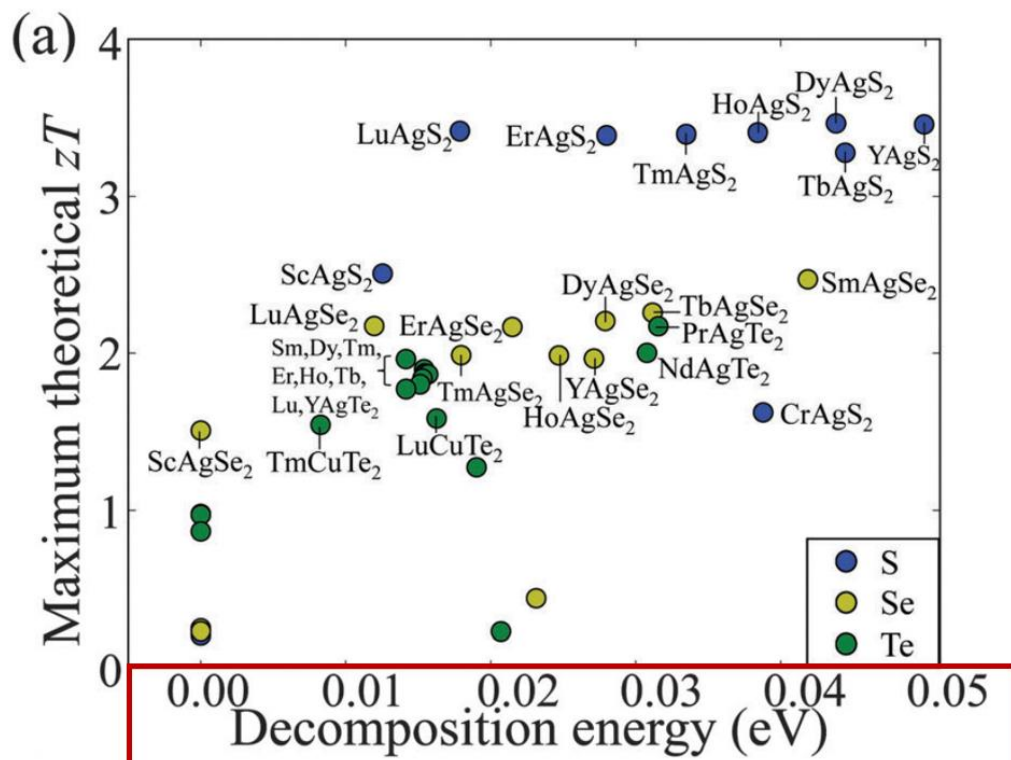
View Article Online
View Journal



Cite this: DOI: 10.1039/c5tc01440a

Computational and experimental investigation of TmAgTe_2 and XYZ_2 compounds, a new group of thermoelectric materials identified by first-principles high-throughput screening†

Hong Zhu,^{‡a} Geoffroy Hautier,^b Umut Aydemir,^c Zachary M. Gibbs,^d Guodong Li,^c Saurabh Bajaj,^c Jan-Hendrik Pöhls,^e Danny Broberg,^f Wei Chen,^g Anubhav Jain,^f Mary Anne White,^d Mark Asta,^e G. Jeffrey Snyder,^c Kristin Persson^f and Gerbrand Ceder^{*afg}



Быстрые и точные расчеты термоэлектрических свойств – программа AICON (Fan & Oganov, 2020, 2021).



Computer Physics Communications

Volume 251, June 2020, 107074

AICON: A program for calculating thermal conductivity quickly and accurately ☆, ☆☆

Tao Fan , Artem R. Oganov



Computer Physics Communications 266 (2021) 108027

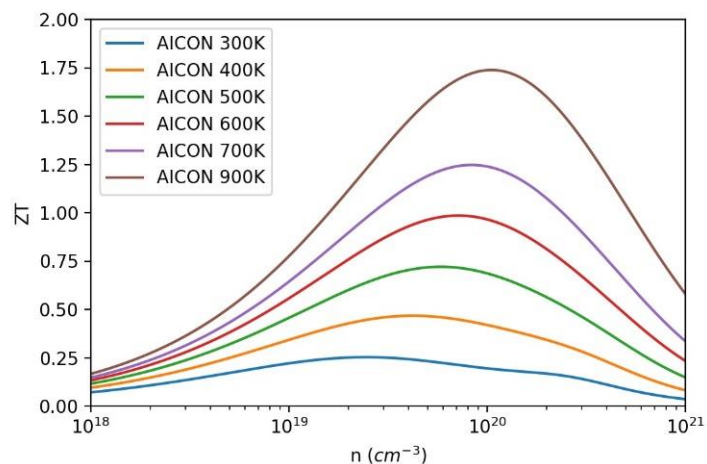
Contents lists available at ScienceDirect

Computer Physics Communications

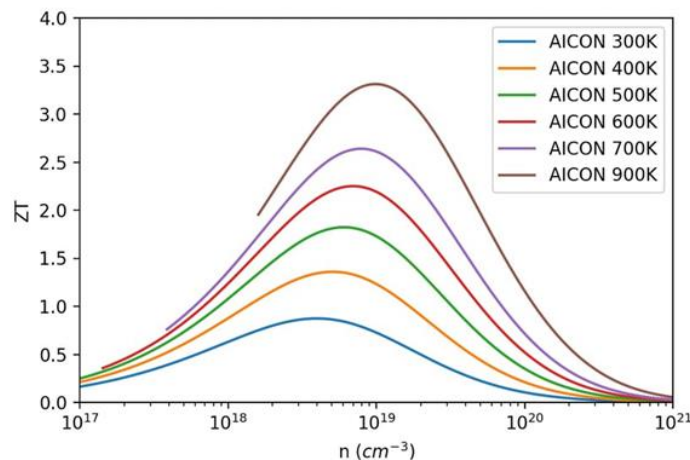
www.elsevier.com/locate/cpc

AICON2: A program for calculating transport properties quickly and accurately ☆, ☆☆

Tao Fan ^{*}, Artem R. Oganov



AlTe, n-тип



Предсказанные нами материалы имеют ZT до ~3.4. В случае подтверждения, будет рекордом.

Новые перспективные термоэлектрики (Fan & Oganov, *J. Mater. Chem C*, 2021).

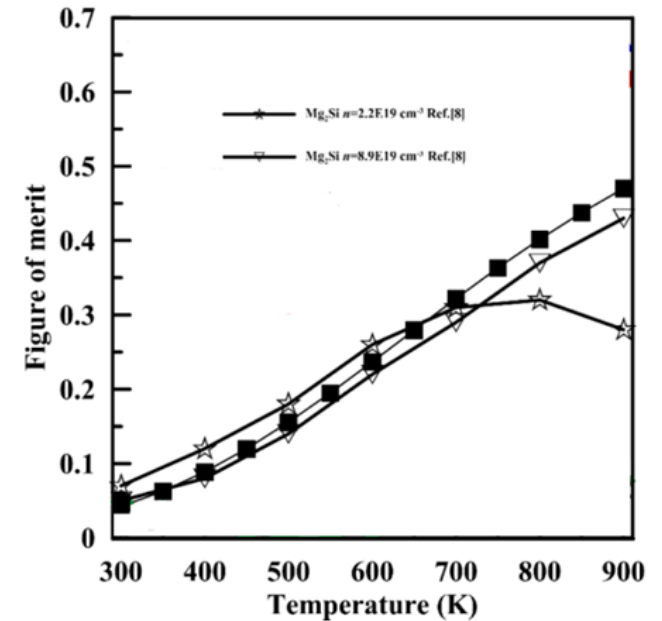
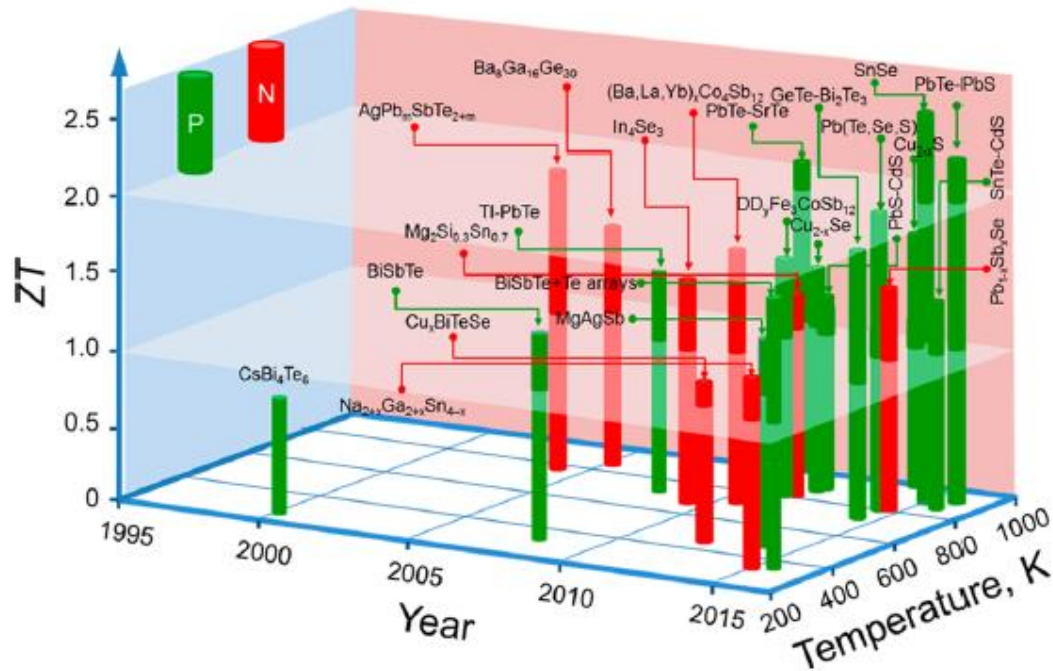
Table 1 Compounds with calculated maximum ZT values larger than 1 in temperature range 300–1000 K. The entry id corresponds to its Materials ID in the Materials Project

Formula	Entry id	Doping type	PF_{\max} ($\mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$)	ZT_{\max}
CoAsS	mp-16363	p-Type	90.58	1.14
CoAsSe	mp-1226036	p-Type	101.91	1.25
PtSnSe	mp-1218926	p-Type	63.22	1.51
RhAsSe	mp-1228724	p-Type	103.27	1.13
RhPSe	mp-1102531	p-Type	105.54	1.21
IrBiSe	mp-1103228	p-Type	73.27	1.18
IrSbTe	mp-1102430	p-Type	96.18	1.43
CdSe ₂	mp-1095493	n-Type	21.77	1.35
KAcTe ₂	mp-863710	n-, p-type	11.05(n), 12.61(p)	2.17(n), 2.24(p)
RbAcTe ₂	mp-862797	n-, p-type	13.51(n), 13.11(p)	2.93(n), 2.72(p)
CsAcTe ₂	mp-867341	n-, p-type	10.35(n), 12.22(p)	2.84(n), 3.07(p)
GaAcTe ₂	mp-861884	n-, p-type	29.58(n), 7.68(p)	6.99(n), 3.05(p)
InAcTe ₂	mp-867112	n-, p-type	29.83(n), 10.89(p)	2.99(n), 1.67(p)
TlAcTe ₂	mp-865028	n-, p-Type	36.01(n), 23.03(p)	4.27(n), 3.26(p)
Hg ₂ Al ₄ Se ₈	mp-1103510	p-Type	67.72	1.63
Cd ₂ In ₄ Se ₄ S ₄	mp-1226914	p-Type	27.29	1.12
Hg ₂ In ₄ S ₈	mp-22356	p-Type	41.04	1.30
Nb ₆ Sb ₄ Te ₁₀	mp-569571	p-Type	37.13	1.11
MgTe	mp-1008786	p-Type	52.55	1.32

Как улучшить КПД термоэлектрических приборов?

“Не надо работать над полупроводниками, это грязь и бардак; кто знает, существуют ли вообще полупроводники»”

-В. Паули, в письме Р. Пайерлсу (1931)



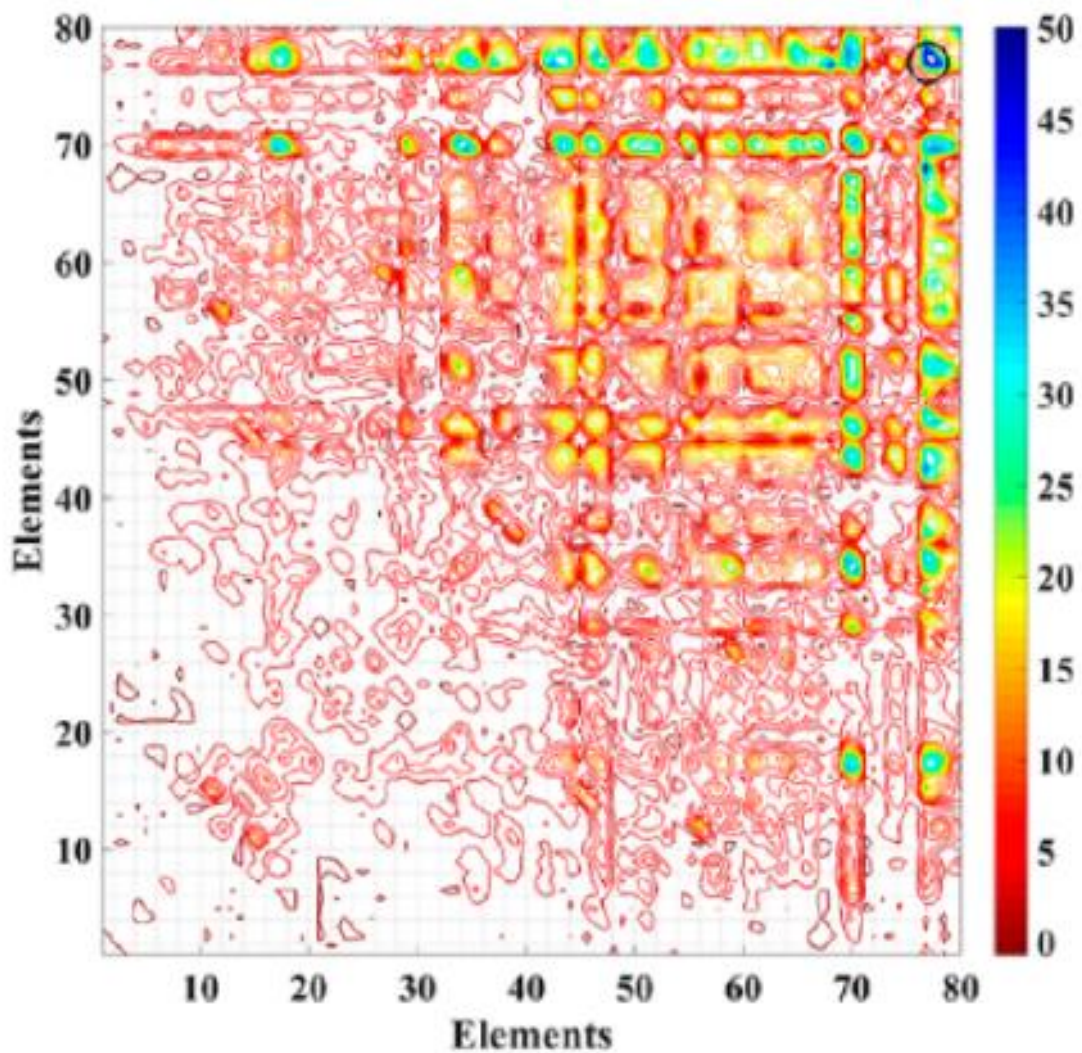
[Fan & Oganov (2018)]

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa}$$

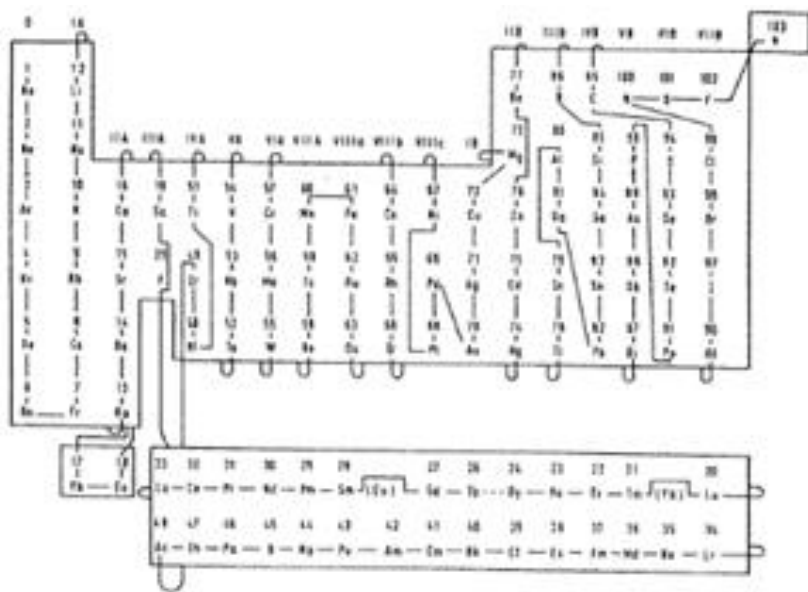
$$S = \frac{8\pi^2 k_B^2}{3eh^2} m^* T \left(\frac{\pi}{3n} \right)^{2/3}$$

$$\eta = \frac{\Delta T}{T_H} \frac{\sqrt{1+zT} - 1}{\sqrt{1+zT} + \frac{T_C}{T_H}} \quad \text{- КПД}$$

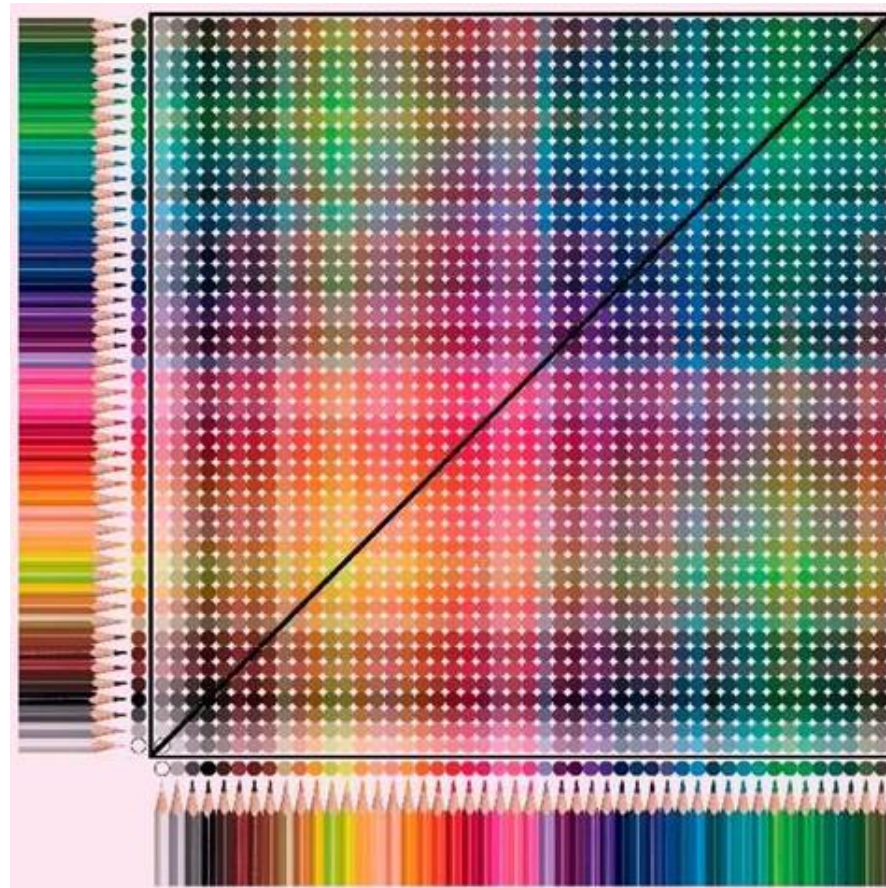
Как предсказать лучший материал из всех возможных соединений?



Менделеевское число (Pettifor, 1984). Предсказания стабильности, структуры и свойств материалов

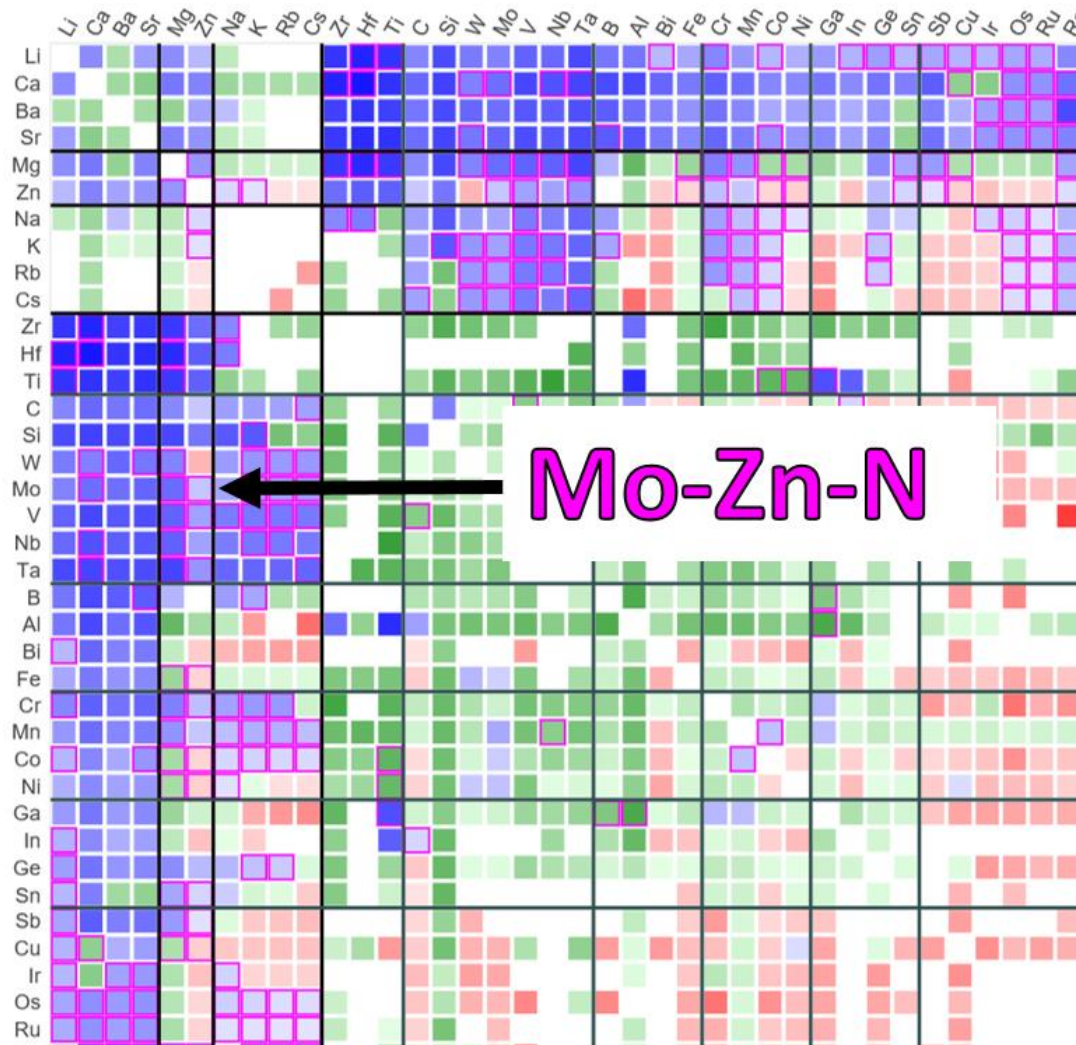


Менделеевское число элементов



Аналогия цветных карандашей

Пример: поиск новых стабильных нитридов (Sun, 2019)



916 система

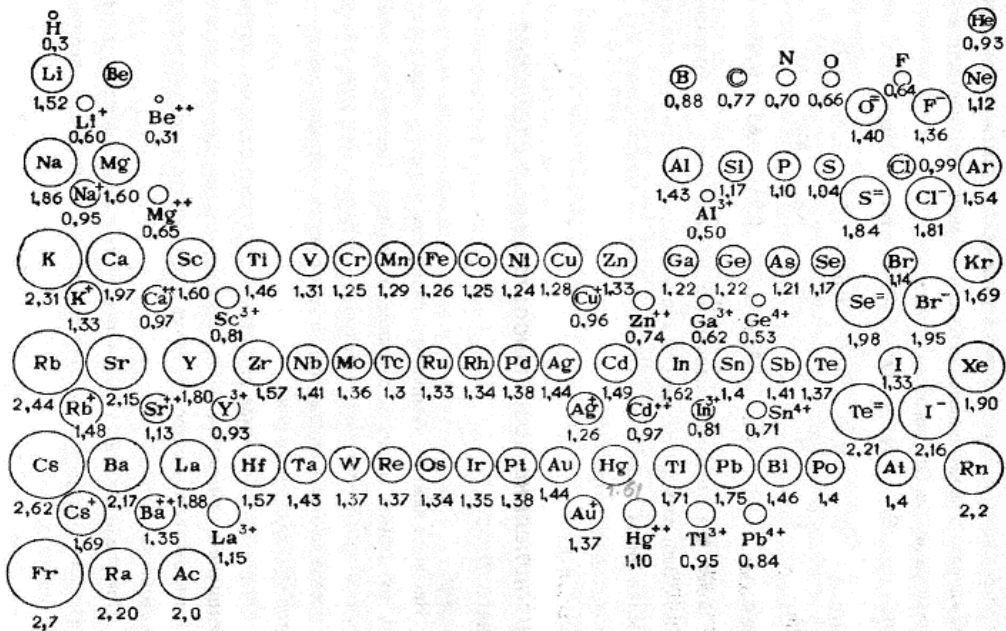
246 содержит стабильные нитриды

В 127 из них нитриды еще не получены

Свойства атомов неплохо известны

Электроотрицательность – способность атома перетягивать электроны на себя. Атомы с разными электроотрицательностями образуют выгодные связи.

Периодическая таблица элементов по Кэмбеллу с атомными и ионными радиусами



Радиусы

H																	He
2.20																	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
0.98	1.57											2.04	2.55	3.04	3.44	3.98	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
0.93	1.31											1.61	1.90	2.19	2.58	3.16	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.82	1.00	1.36	1.54	1.63	1.66	1.55	1.83	1.88	1.91	1.90	1.65	1.81	2.01	2.18	2.55	2.96	3.00
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.82	0.95	1.22	1.33	1.6	2.16	1.9	2.2	2.28	2.20	1.93	1.69	1.78	1.96	2.05	2.1	2.66	2.60
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.79	0.89		1.3	1.5	2.36	1.9	2.2	2.20	2.28	2.54	2.00	1.62	2.33	2.02	2.0	2.2	2.2
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
0.7	0.9																
*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
	1.1	1.12	1.13	1.14	1.13	1.17	1.2	1.2	1.1	1.22	1.23	1.24	1.25	1.1	1.27		
**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		
	1.1	1.3	1.5	1.38	1.36	1.28	1.13	1.28	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3		

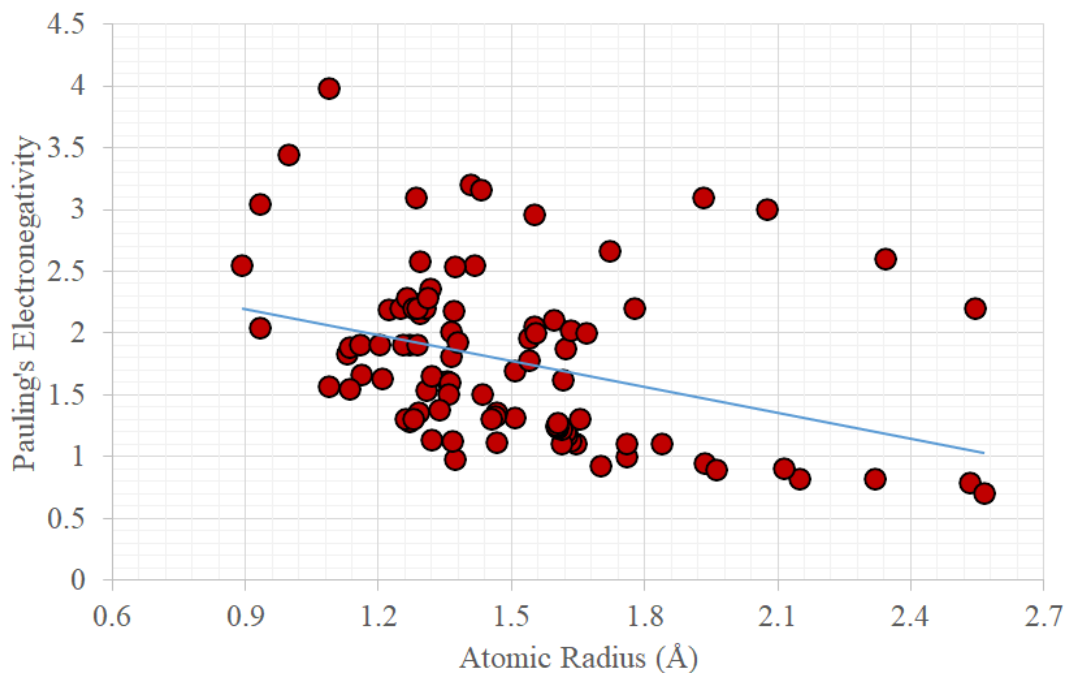
Электроотрицательности по Полингу

Как построить химическое пространство?

[Allahyari & Oganov, *J. Phys. Chem. C*, 2020]

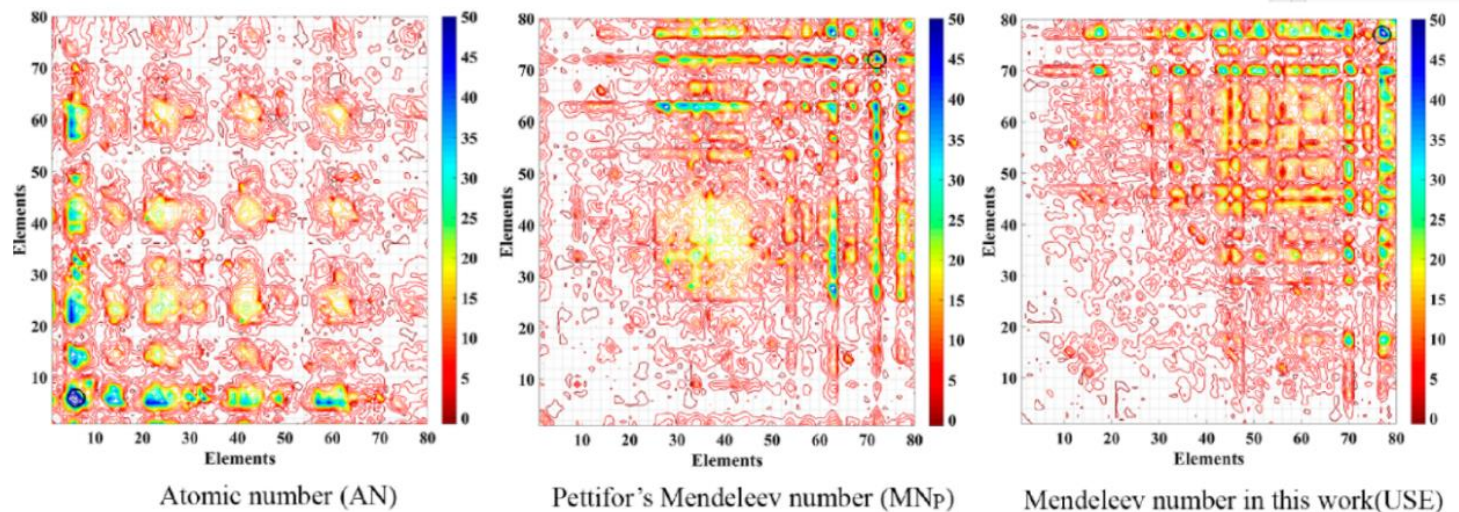
Закон Гольдшмидта (1929, 1955): кристаллическая структура определяется стехиометрией и свойствами атомов (размерами, поляризуемостями, электроотрицательностями).

Пространство «размер-электроотрицательность- (поляризуемость)» – сильно вытянутое облако. Его главная компонента – **наилучшее описание свойств элементов одним параметром – и есть менделеевское число.**

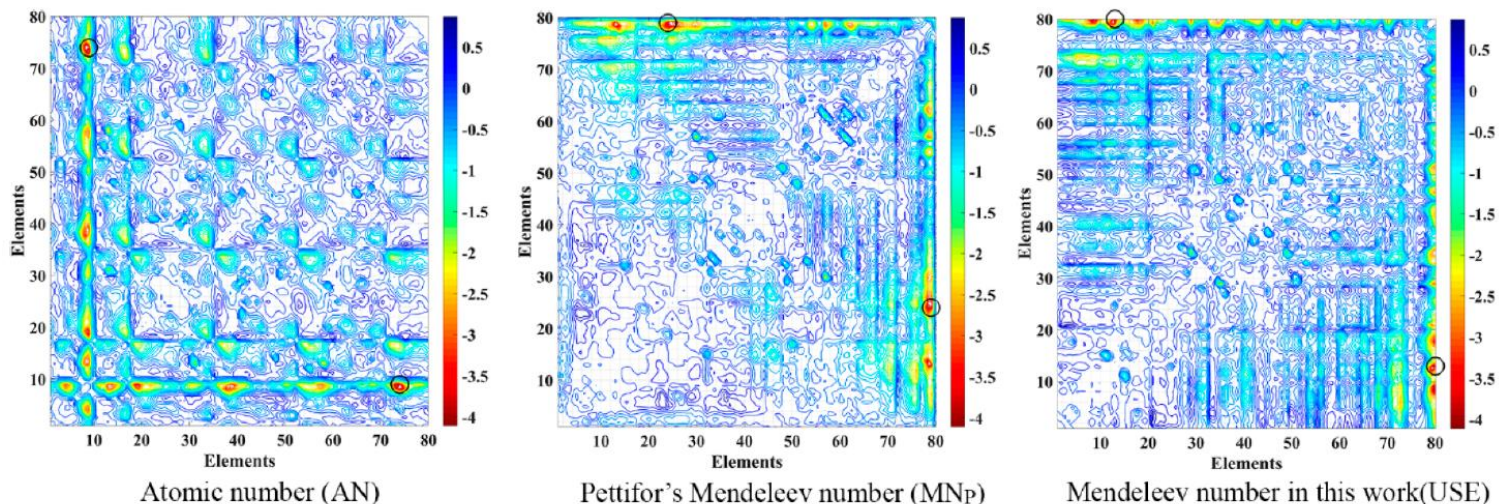


Mendelev Number	Atom	Mendelev Number	Atom	Mendelev Number	Atom
1	Fr	32	Tl	62	Po
2	Cs	33	U	63	Fe
3	Rb	34	Pa	64	Cu
4	K	35	Zr	65	Co
5	Ra	36	Pu	66	As
6	Ba	37	Np	67	Ni
7	Sm	38	Nb	68	Kr
8	Gd	39	Ta	69	Mo
9	Eu	40	In	70	I
10	Sr	41	Pb	71	Pd
11	Tm	42	Cd	72	Ir
12	Pm	43	Xe	73	Os
13	Ca	44	Ti	74	P
14	Na	45	Al	75	Ru
15	Ac	46	Bi	76	Pt
16	La	47	Sn	77	At
17	Yb	48	Hg	78	Rh
18	Tb	49	Zn	79	W
19	Y	50	Ga	80	Rn
20	Dy	51	V	81	Se
21	Ho	52	Mn	82	B
22	Ce	53	Sb	83	Au
23	Er	54	Te	84	S
24	Li	55	Cr	85	Br
25	Th	56	Ag	86	H
26	Lu	57	Be	87	C
27	Pr	58	Ge	88	Cl
28	Nd	59	Re	89	N
29	Mg	60	Si	90	O
30	Sc	61	Tc	91	F
31	Hf				

Неэмпирическое менделеевское число работает лучше, чем эмпирические [Allahyari & Oganov, *J.Phys.Chem. C.*, 2020]



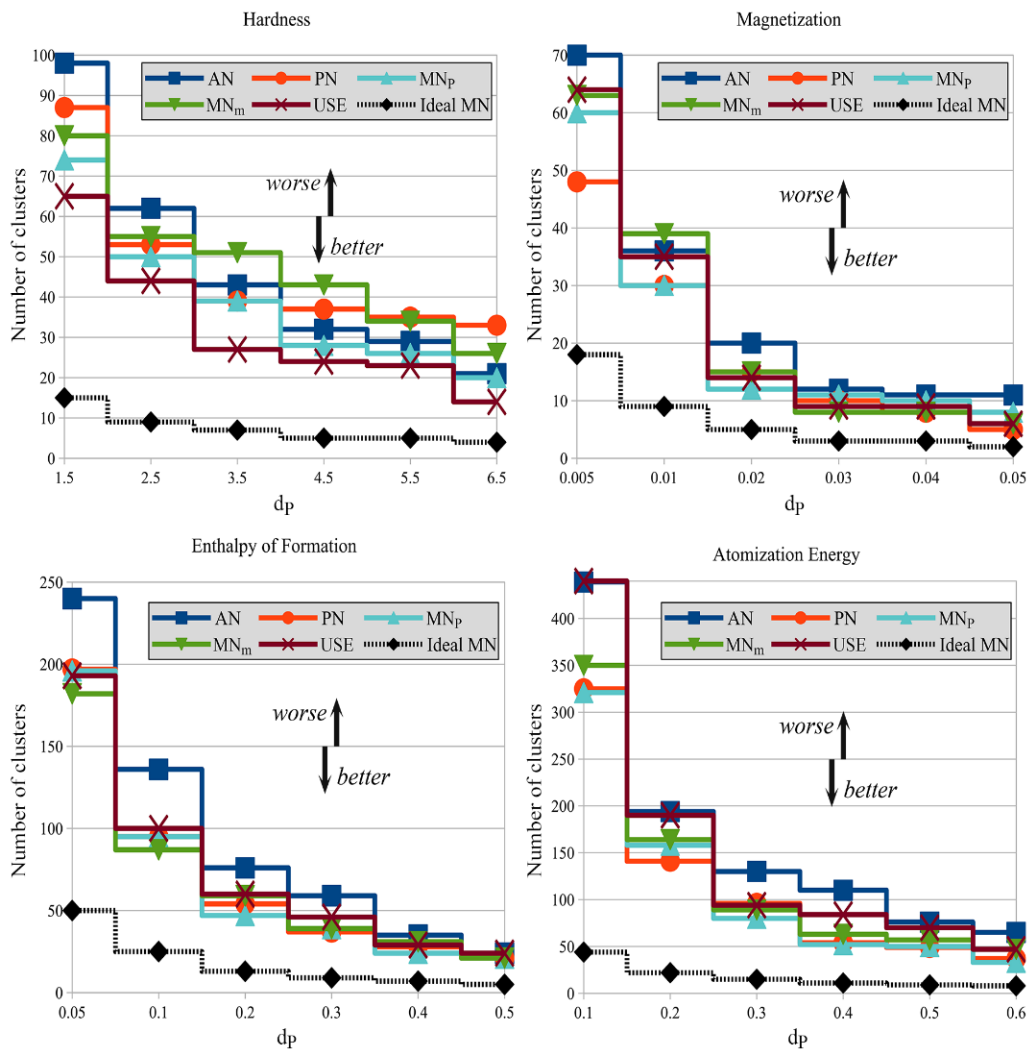
Группировка соединения по твердости: (а) по атомному номеру, (b) по менделеевскому числу Петтифора, (с) по нашему



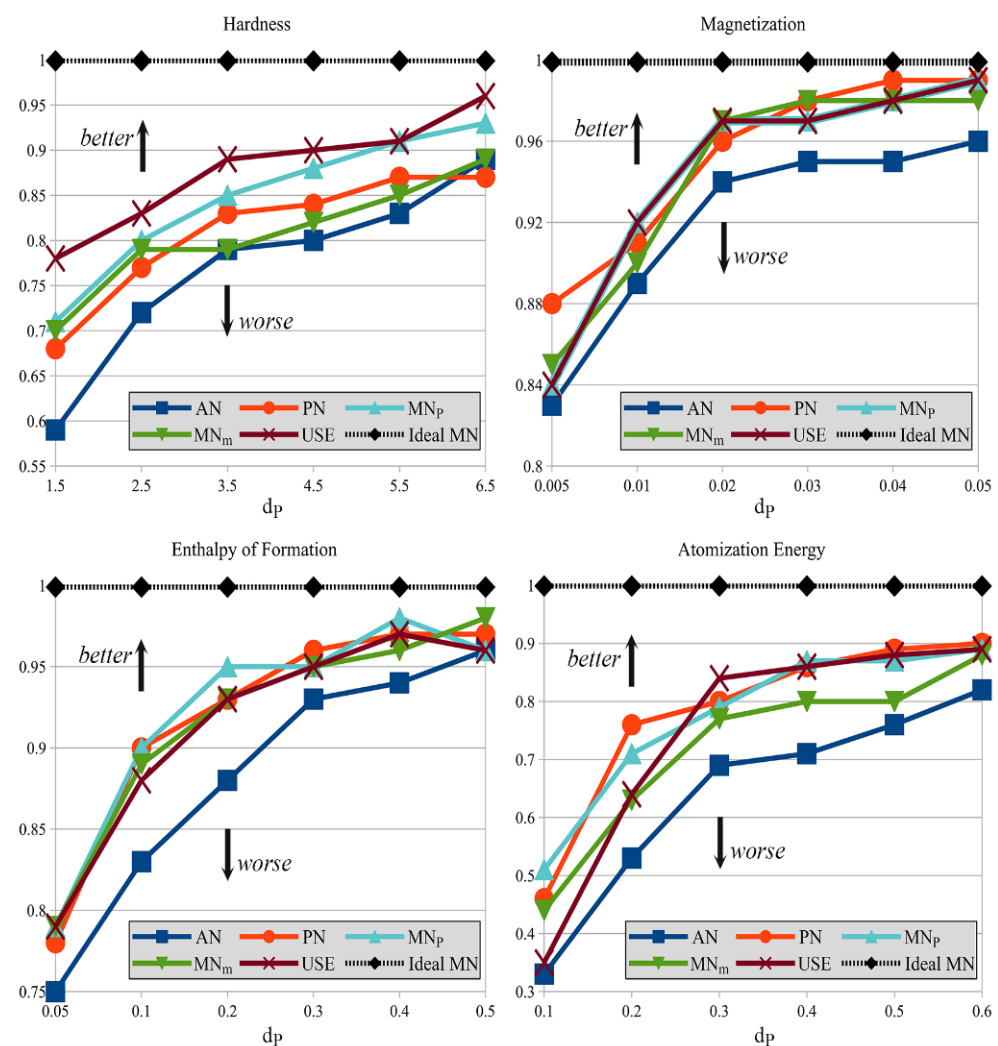
Энтальпии образования соединений. Самые экзотермические соединения образованы сильно отличающимися атомами: ThF_4 (-4.11 eV/atom), AcF_3 (-4.09 eV/atom), CaF_2 (-3.92 eV/atom), ZrF_4 (-3.62 eV/atom), Th_4O_7 (-3.61 eV/atom), Y_2O_3 (-3.48 eV/atom), Al_2O_3 (-2.95 eV/atom), CaO (-2.95 eV/atom), SiO_2 (-2.79 eV/atom).

Статистический анализ показывает, что наше менделеевское число работает лучше остальных [Allahyari & Oganov, *J.Phys.Chem. C*, 2020]

Number of clusters



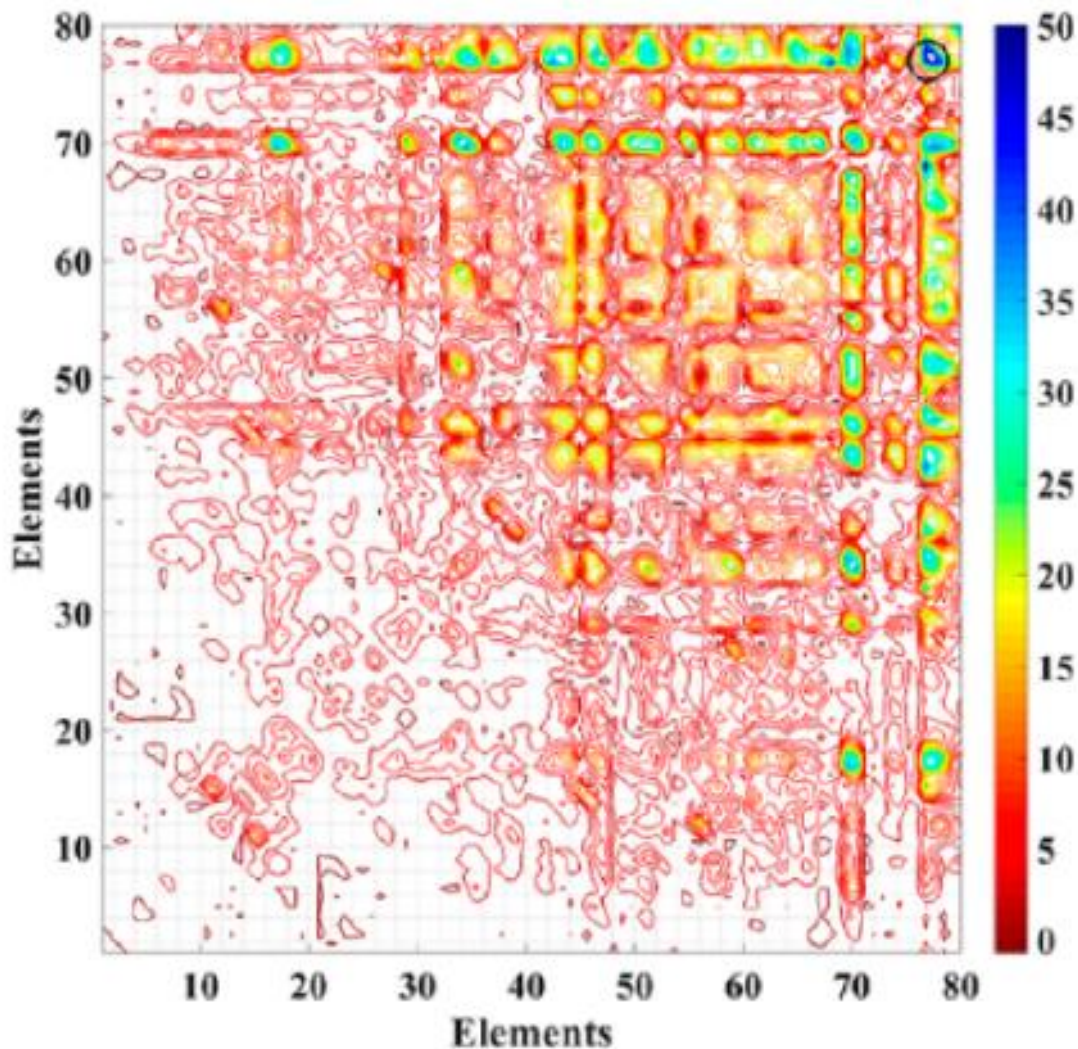
Fraction of systems that are covered by N_{min} number of clusters



AN: atomic number ; PN: Periodic number ; MN_p : Pettifor's MN ; MN_m : modified MN ; USE: MN in this work.

Менделеевский поиск – метод предсказания оптимальных материалов среди всех возможных соединений

[Allahyari & Oganov, *NPJ Computational Materials*, 2020]

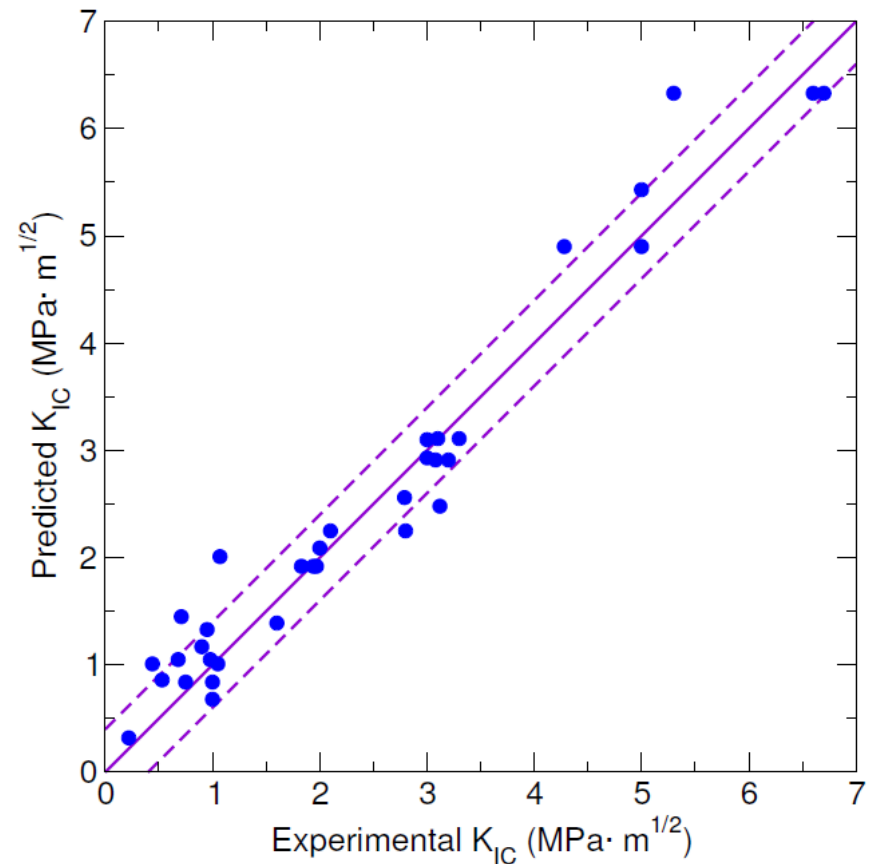
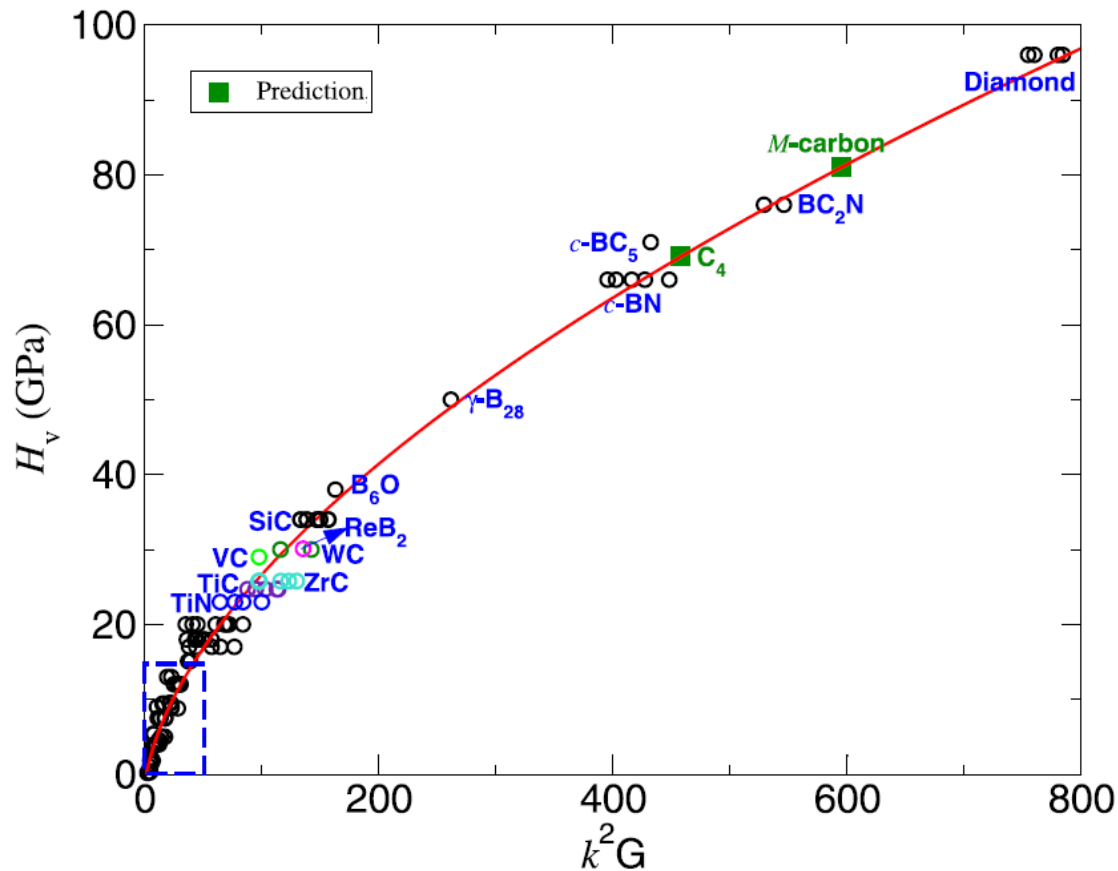


- 118 элементов
- 7021 бинарных систем
- 273937 тройных систем
- В каждой системе - ∞ структур

Предсказательные модели сложных свойств: твердости [Chen et al., 2011] и трещиностойкости [Niu & Oganov, 2019]

$$H_v = 2(k^2G)^{0.585} - 3$$

$$K_{IC} = (1 + \alpha) \cdot V^{1/6} \cdot G \cdot (B/G)^{1/2}$$



Улучшение этих моделей: Mazhnik & Oganov (J. Appl. Phys. 2019)

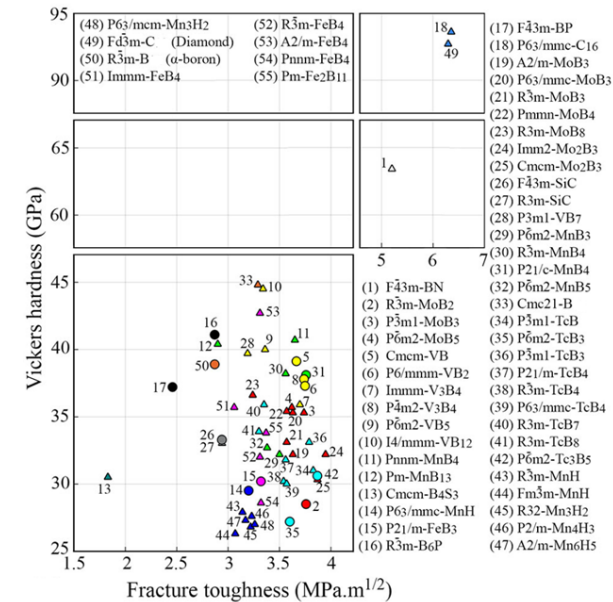
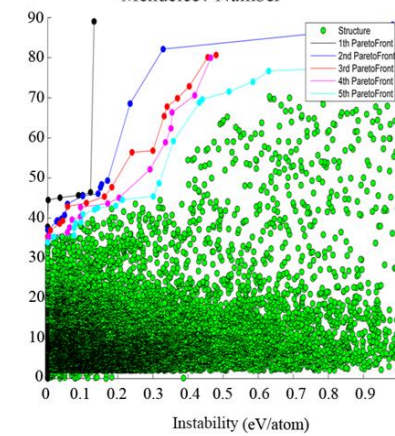
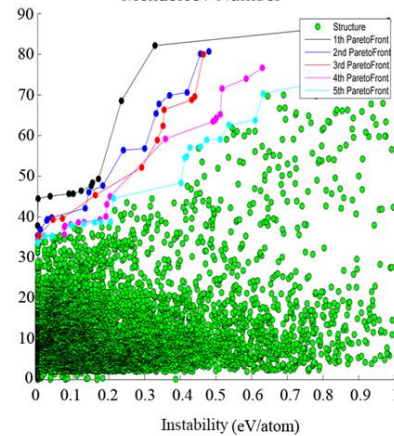
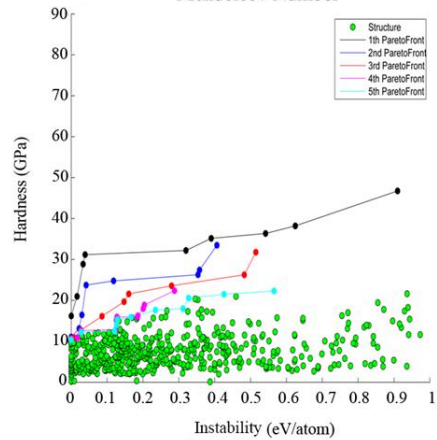
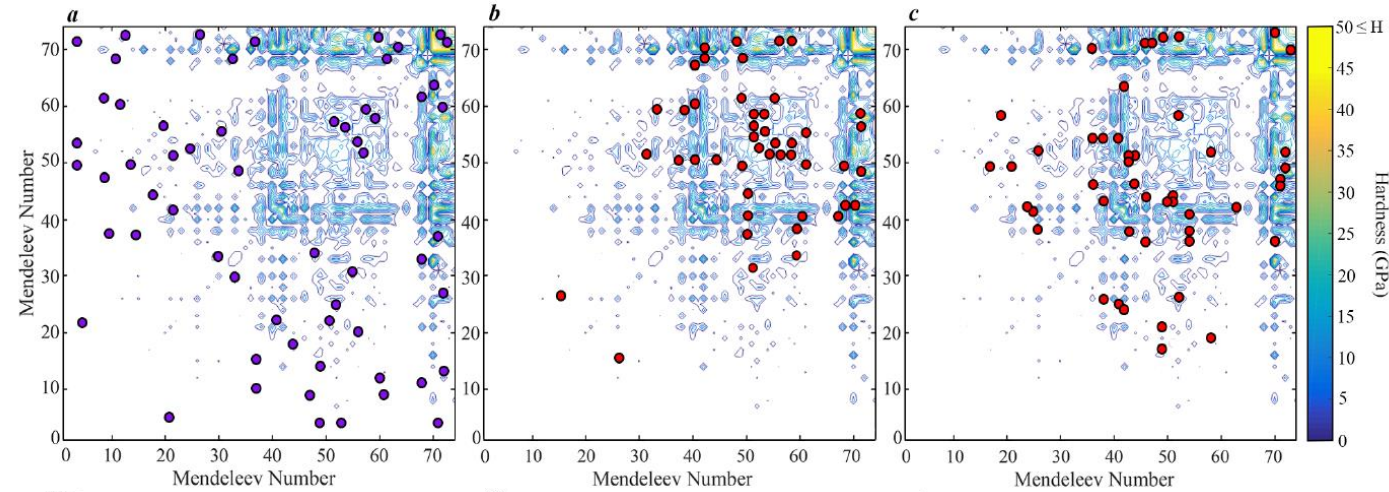
Менделеевский поиск самого твердого материала: находит алмаз и лонсдейлит!

[Allahyari & Oganov, *NPJ Computational Materials*, 2020]

1^е поколение

5^е поколение

10^е поколение



А как же материалы тверже алмаза? Пример «пентаалмаза».

- Fujii (PRL, 2020): по упругим модулям «пентаалмаз» в разы превосходит алмаз.
- Машинное обучение и квантовые расчеты опровергли эти результаты (Brazhkin & Oganov, arxiv.org). https://uspex-team.org/online_utilities/elasticml/

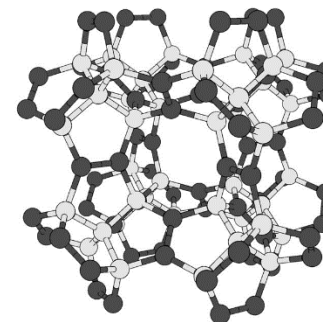
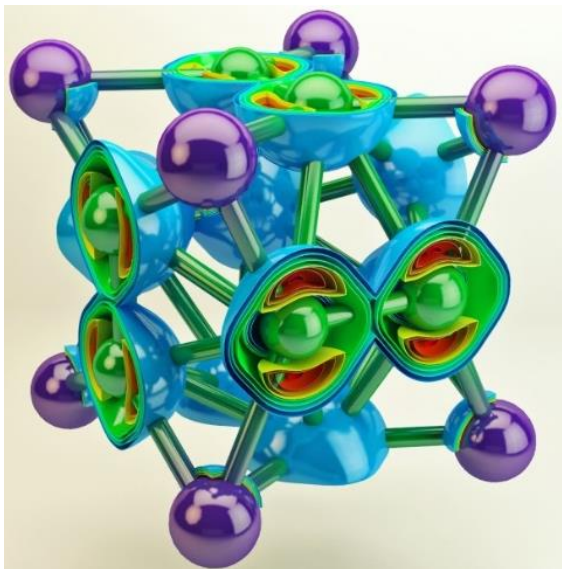


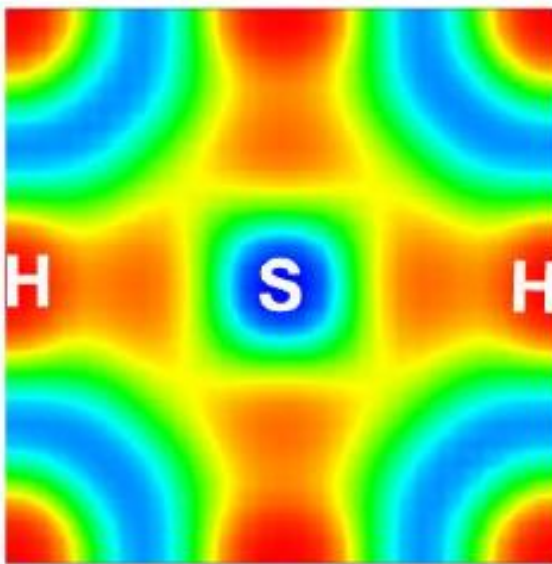
Table 1. Calculated elastic properties of pentadiamond in comparison with Y. Fujii et al. [1].

Property	Y. <u>Fujii</u> et al. [1]	This work (Quantum ESPRESSO)	This work (VASP)	This work (machine learning)
a, Å	9.195	9.184	9.191	9.195
E-E(diam), meV/atom	275	263	267	-
C ₁₁ , GPa	1715.3	539	537	409
C ₁₂ , GPa	-283.5	105	106	118
C ₄₄ , GPa	1187.5	141	143	200
B, GPa	381	250	249	215
G, GPa	1113	172	169	176
Y, GPa	1691	420	413	415
σ	-0.241	0.22	0.22	0.18
H _v , GPa	210	20	20	26

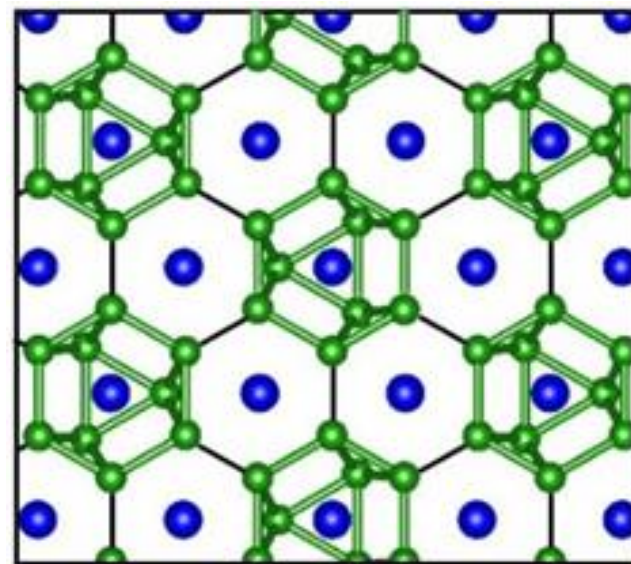
Новые алгоритмы позволяют предсказывать новые материалы и помогают познать природу



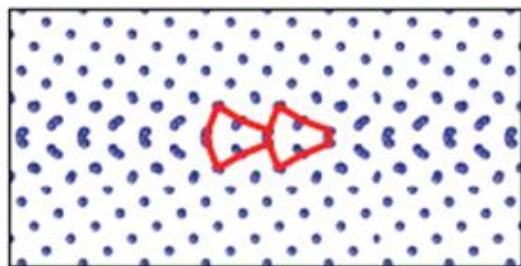
Необычные химические соединения



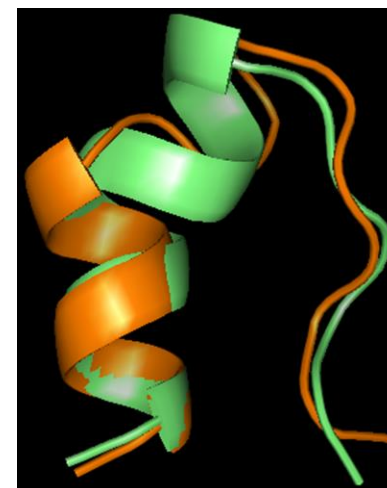
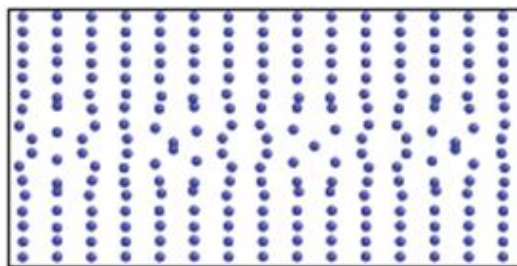
Новые рекордные сверхпроводники



Новые сверхтвердые материалы



Предсказание структуры межзеренных границ



Предсказание структуры белков

Домашние задания

- Посмотреть видеолекции:

<https://www.youtube.com/watch?v=hYSmMA0x8lc>

https://www.youtube.com/watch?v=4zLaP_AeL4M

<https://www.youtube.com/watch?v=oiGWbOHemhg>

<https://www.youtube.com/watch?v=rMIxH7rCW2o>

https://www.youtube.com/watch?v=kUMP_xa9NHc

- Сделайте один из расчетов: либо по кристаллу $MgAl_2O_4$ (EX02), либо по Леннард-Джонсовской наночастице (EX08), либо расчет с переменным составом для системы «Mo-B». Посмотрите на структуры с помощью программы VESTA – она, кстати, умеет смотреть файлы программы USPEX с множеством структур.
- Проведите поиск самых твердых и самых стабильных фаз в системе «Mo-B», используя оптимизацию по Парето.

Практические занятия

Программы:

GULP *Грубые расчеты на основе потенциалов межатомного взаимодействия.*

VASP *Наиболее популярная в мире программа для квантово-механических расчетов материалов с помощью теории функционала плотности.*

Суперкомпьютер Oleg моей лаборатории, вход для практических занятий нашего курса:

С помощью программы Putty:

IP address: 195.133.216.203

Login: teacher

Password: 17d3265f

Последовательность действий:

1. Скопируйте папку Oganov в папку с Вашей фамилией (например, Иванов):

```
cp -r Oganov Ivanov
```

2. Зайдите в папку с Вашей фамилией (например, Иванов)

```
cd Ivanov
```

3. Затем зайдите в нужную Вам папку для выполнения расчетов или просмотра файлов.

module load python/python36, а потом в зависимости от программы, которую хотите использовать:

```
module load usrex/usrex-10.5
```

```
module load gulp/gulp
```

```
module load vasp/6.1.1
```

4. Запускать надо командой

```
sbatch jobscript
```

Важно

В скрипте jobscript нужно прописать:

module load gulp/gulp

Запуск задач

sbatch jobscript

Проверка задач в очереди (дает также номерзадачи - jobid)

squeue -u teacher

Удаление задачи

scancel jobid

Руководство программы USPEX:

https://uspex-team.org/online_utilities/uspex_manual_release/EnglishVersion/uspex_manual_english/