

Как открыть новые материалы для технологий будущего?

Артем Оганов (ARO)



Stony Brook University

The State University of New York

(1) Department of Geosciences

(2) Department of Physics and Astronomy

(3) New York Center for Computational Sciences

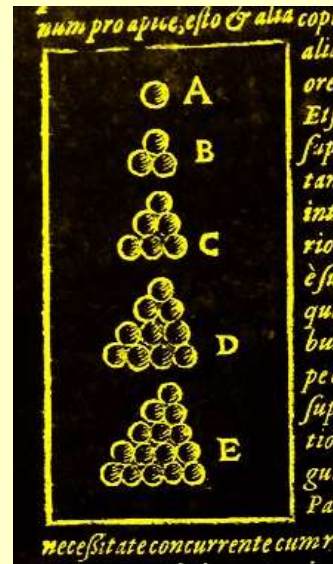
State University of New York, Stony Brook, NY 11794-2100

(4) Moscow State University, Moscow, 119992, Russia.

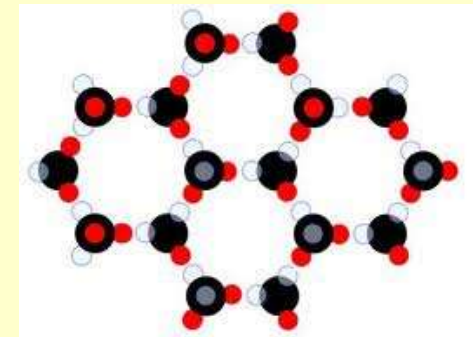
Строение материи: атомы, молекулы

Древние догадывались, что вещество состоит из частиц: «когда еще Он (Бог) не сотворил ни земли, ни полей, ни начальных пылинок вселенной» (Притчи, 8:26)

(также – Эпикур, Лукреций Кар, древние индусы,...)

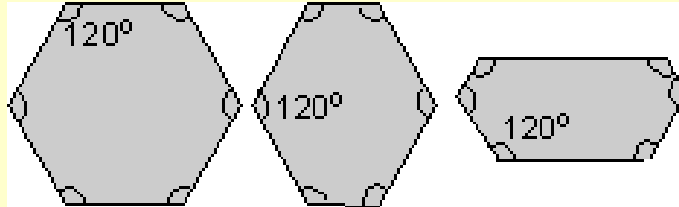


В 1611 г. И. Кеплер предположил, что форма снежинок определяется их атомным строением



структура льда

Строение материи: атомы, молекулы, кристаллы



1669 г. – рождение кристаллографии: Николай Стенон формулирует первый количественный закон кристаллографии



“Кристаллография.. непродуктивна, существует лишь для самой себя, не имеет следствий... не будучи нигде по-настоящему нужной, она развивалась внутри себя. Она дает разуму некое ограниченное удовлетворение, и ее детали столь многообразны, что ее можно назвать неисчерпаемой; именно поэтому она заарканивает даже лучших людей столь цепко и столь надолго»

(И.В. Гете, кристаллограф-любитель, 1749-1832)



Людвиг Больцман (1844-1906) – великий австрийский физик, построивший все свои теории на представлениях об атомах. Критика атомизма привела его к самоубийству **в 1906 г.**

В 1912 г. гипотеза об атомном строении вещества была доказана экспериментами Макса фон Лауэ.

Структура – основа понимания свойств и поведения материалов



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

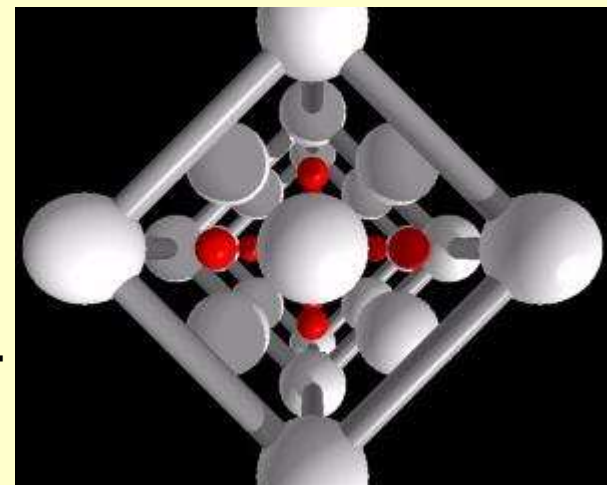
(from <http://nobelprize.org>)



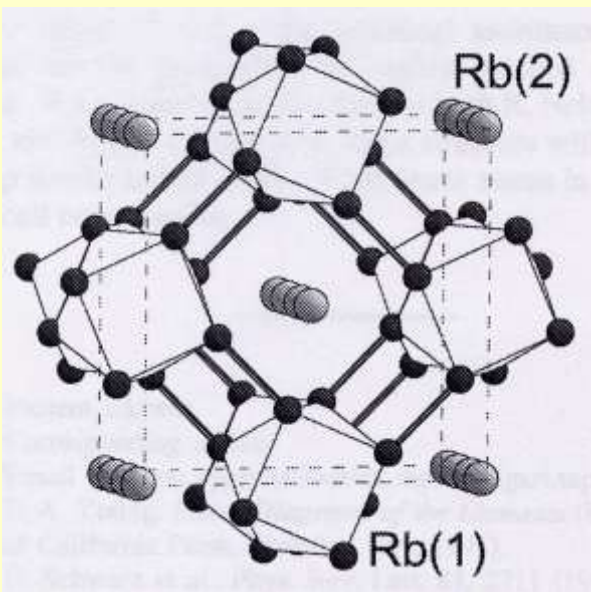
Цинковая обманка ZnS.

Одна из первых структур, решенных Брэггами
В 1913 г.

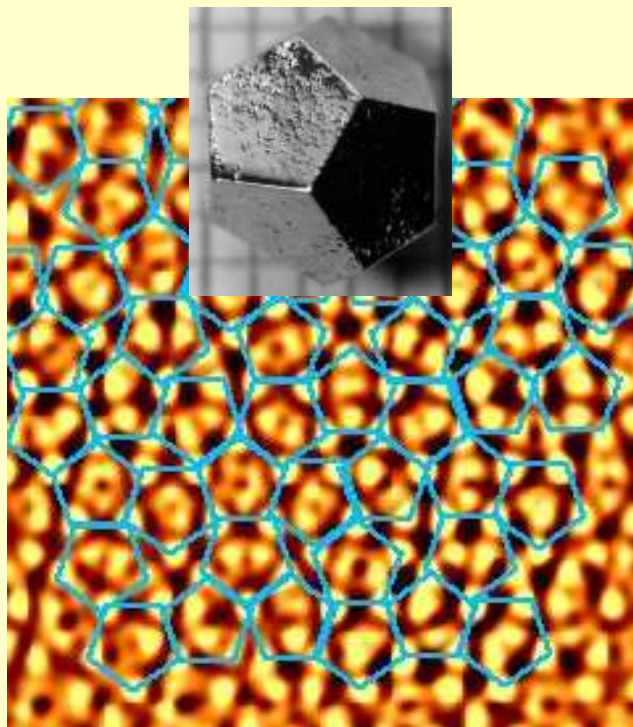
Сюрприз: в структуре НЕТ
молекул ZnS!



Триумфы эксперимента – определение невероятно сложных кристаллических структур



**Несоразмерные фазы
элементов**
(Rb-IV, U.Schwarz'99)



Квазикристаллы

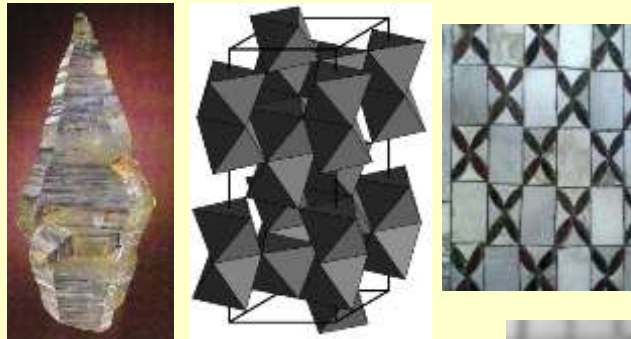
Новое состояние вещества, открытое
в 1982 г. Найдены в природе лишь в 2009!
Нобелевская премия 2011 г.!



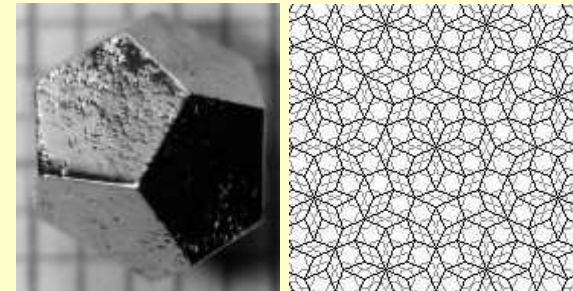
Белки

Состояния вещества

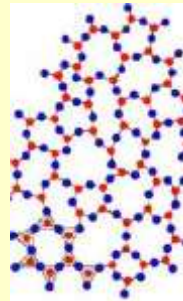
- Кристаллическое



- Квазикристаллическое



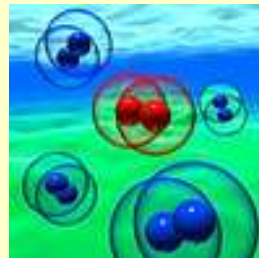
- Аморфное



- Жидкое

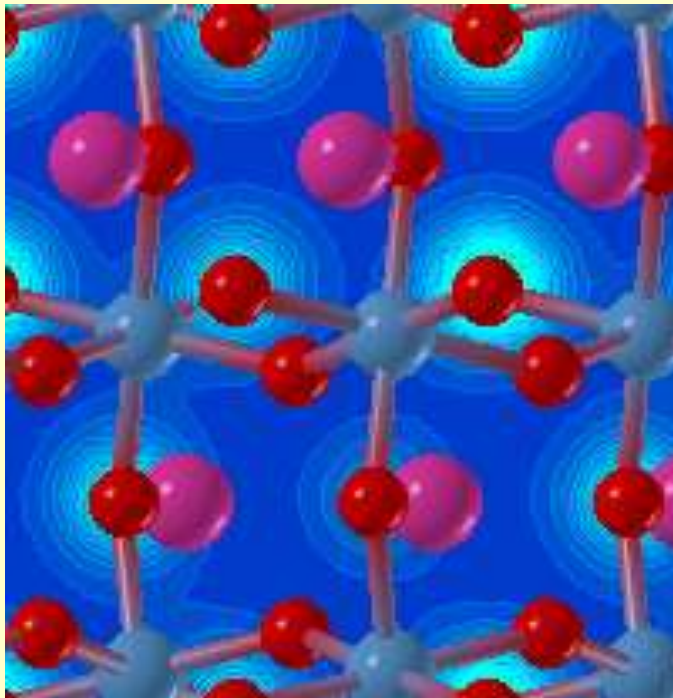


- Газообразное



- („Soft matter“ – полимеры, жидкие кристаллы)

Атомная структура – самая главная характеристика вещества. Зная ее, можно предсказать свойства материала и его электронную структуру



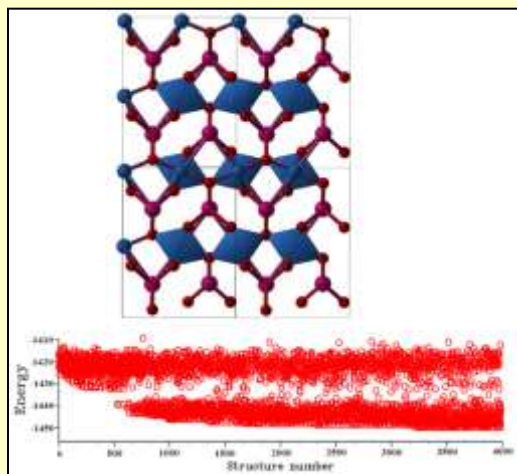
Упругие константы MgSiO_3 перовскита
[ARO et al., Earth. Planet. Sci. Lett. (2001)]

	Теория	Эксп.
C_{11}	493	482
C_{22}	546	537
C_{33}	470	485
C_{12}	142	144
C_{13}	146	147
C_{23}	160	146
C_{44}	212	204
C_{55}	186	186
C_{66}	149	147

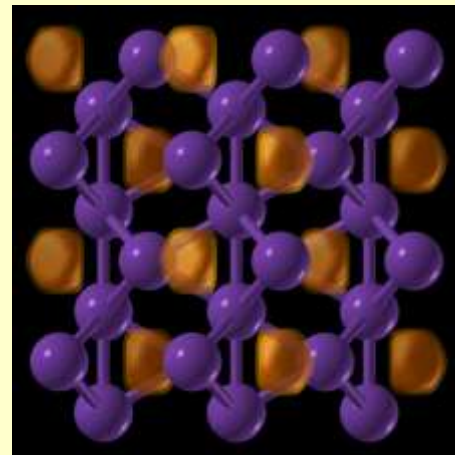
Несколько историй



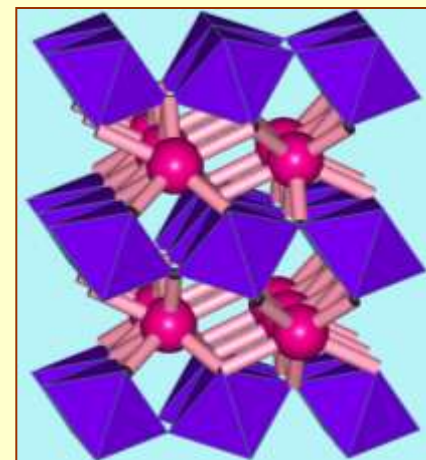
1. О связи
структуры
и свойств



2. Можно ли
предсказывать
кристаллические
структуры?

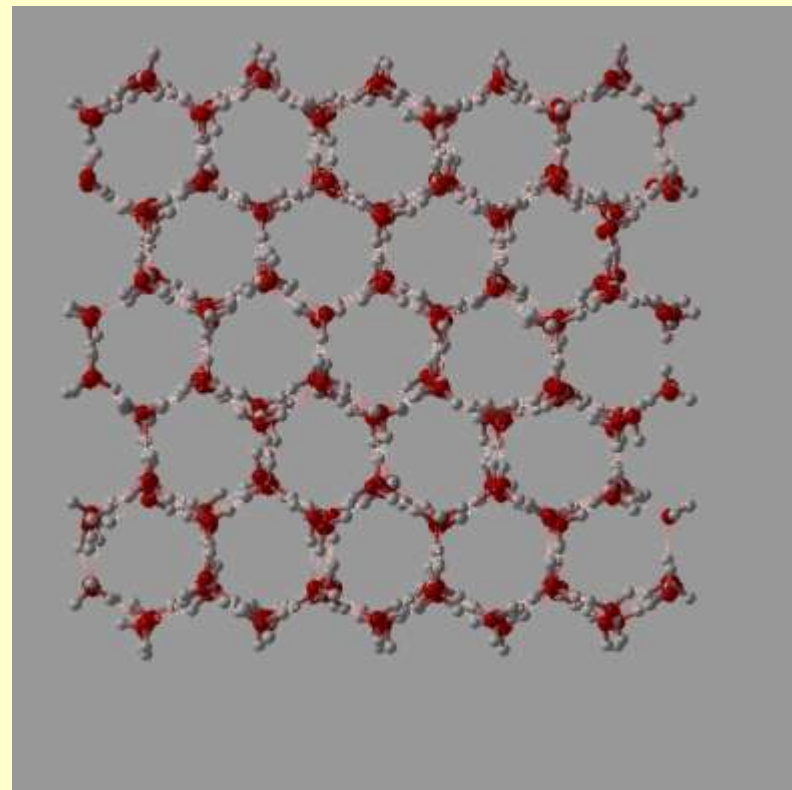


3. Материалы из
компьютера



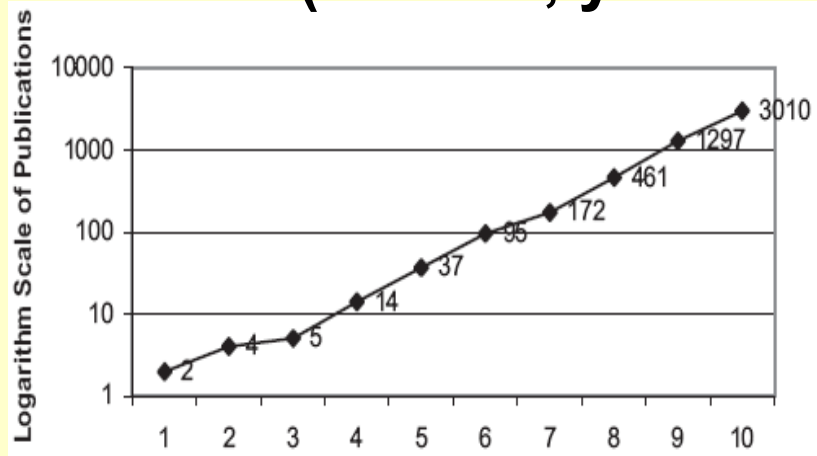
4. Материалы
земных недр

Почему лед легче воды?



Структура льда содержит крупные пустые каналы, которых нет в жидкой воде. Благодаря наличию этих пустых каналов лед легче льда.

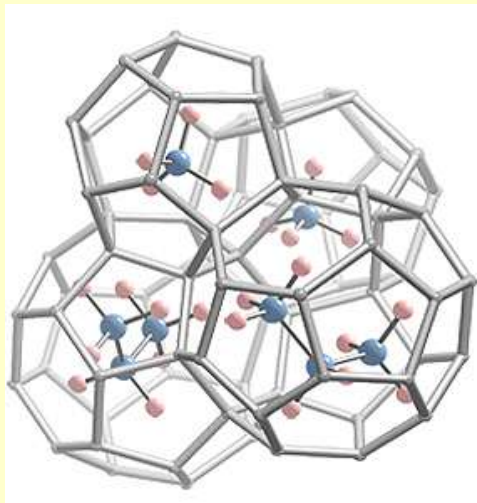
Газовые гидраты (клатраты) – лед с начинкой молекул-гостей (метана, углекислоты, хлора, ксенона, и т.д.)



Число публикация по клатратам



Огромные залежи гидрата метана – надежда и спасение энергетики?



Под небольшим давлением метан и углекислый газ образуют клатраты – 1 литр клатрата содержит 168 литров газа!

Гидрат метана выглядит как лед, но горит с выделением воды.

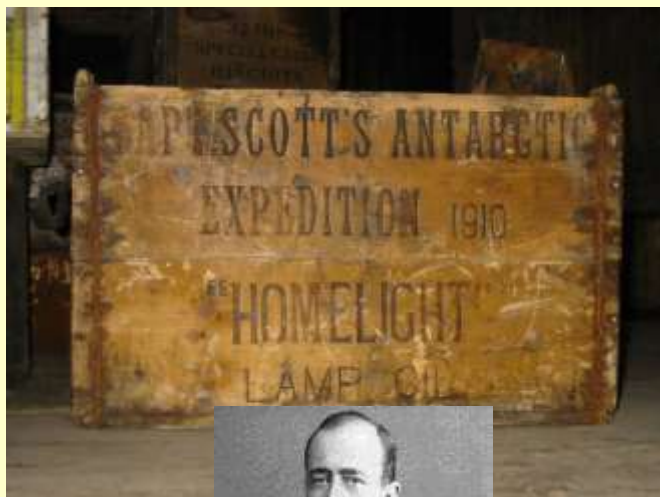
Гидрат CO_2 – форма захоронения углекислого газа?

Механизм ксеноновой анестезии – образование Хе-гидрата, блокирующего передачу нейронных сигналов в мозг (Pauling, 1951)



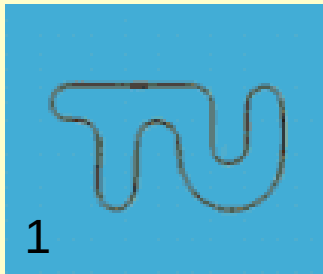
Как материалы могут спасти или погубить

- При низких температурах олово претерпевает фазовый переход – «оловянная чума».
- 1812 г. - по легенде, экспедиция Наполеона в Россию погибла из-за оловянных пуговиц на мундирах!
- 1912 г. – гибель экспедиции капитана Р.Ф. Скотта к Южному Полюсу, которую приписывали «оловянной чуме».



Переход первого рода при 13°C
Белое олово: 7.37 г/см^3
Серое олово: 5.77 г/см^3

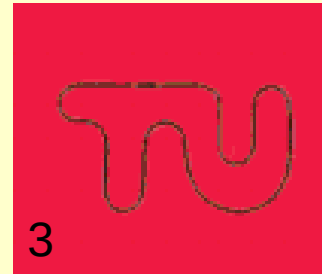
Сплавы с памятью формы



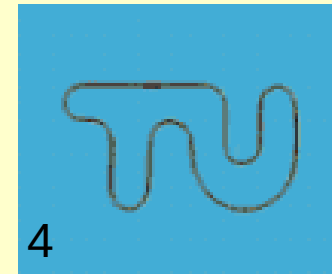
1- до деформации
(20°C)



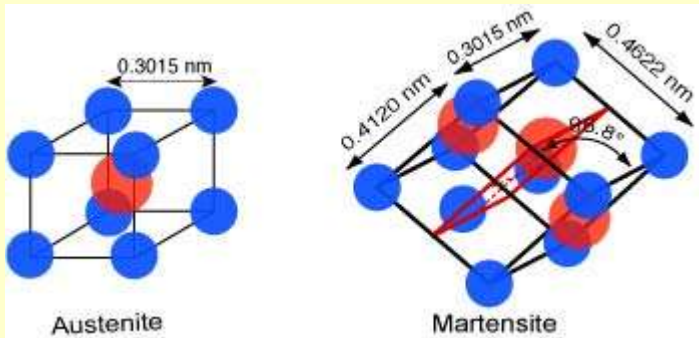
2- после деформации
(20°C)



3- после нагревания
(50°C)



4- после охлаждения
(20°C)



Пример: NiTi (нитинол)

Применения:

Шунты, зубные скобки,
элементы нефтепроводов и авиадвигателей



Цвет зависит от направления (плеохроизм). Пример: кордиерит $(\text{Mg,Fe})_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$.

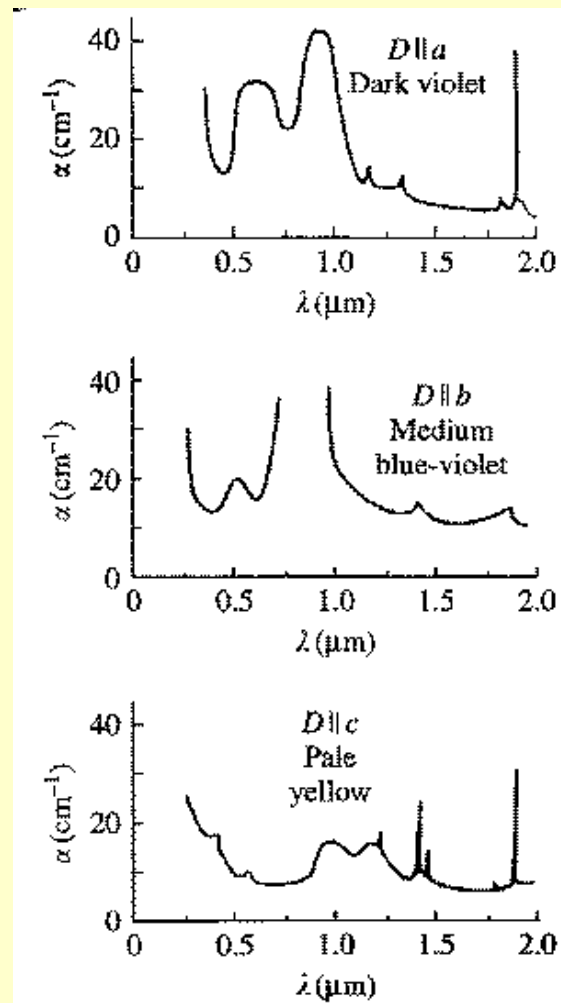
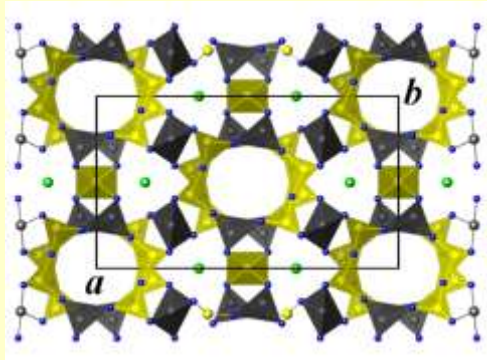
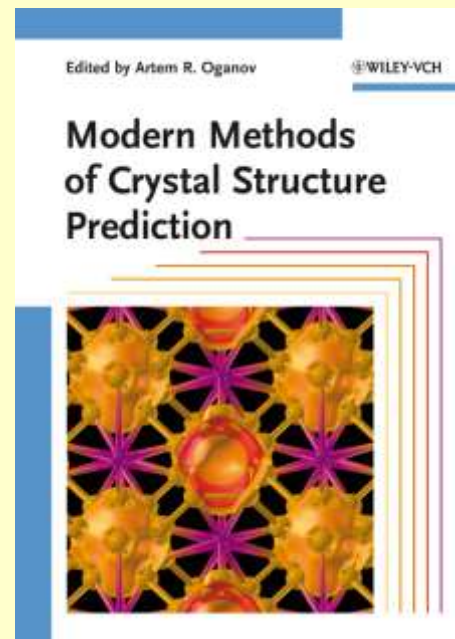
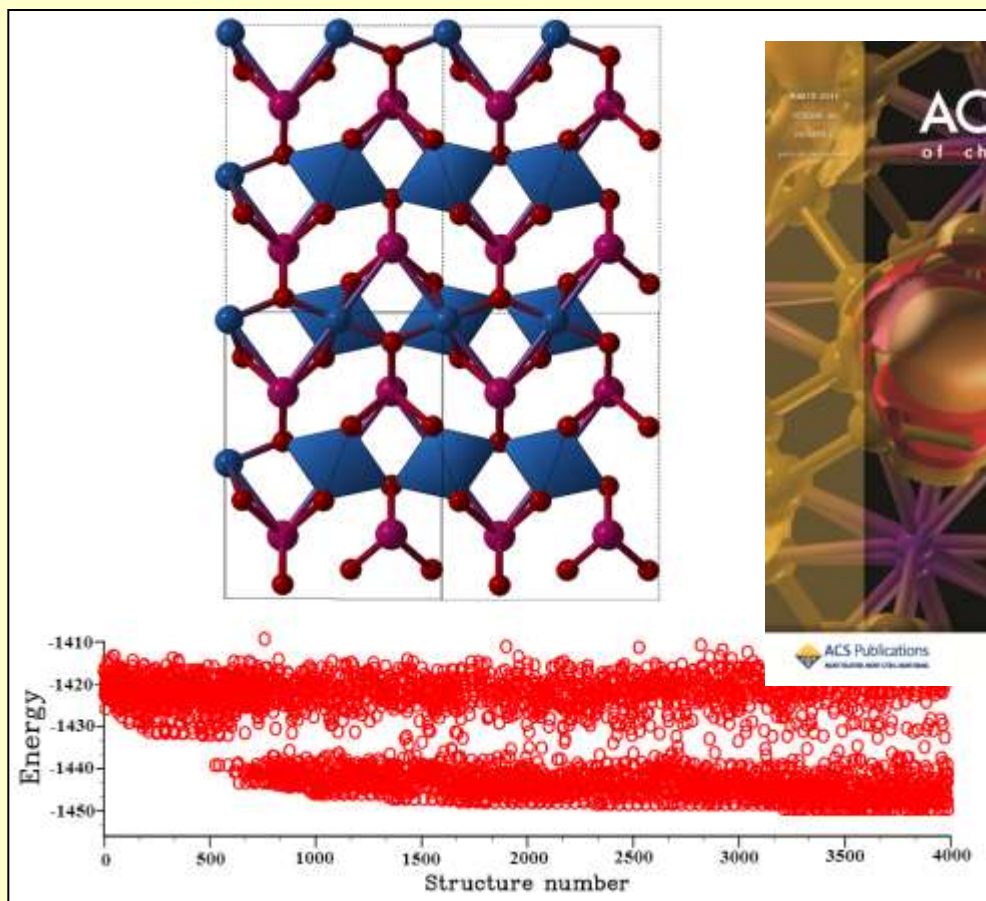


Fig. 26.5 Pleochroism in the mineral cordierite. Light polarized parallel to the orthorhombic [100] and [010] directions are more strongly absorbed than along [001].

2. Предсказание кристаллических структур



Oganov A.R., Lyakhov A.O., Valle M. (2011).
How evolutionary crystal structure prediction works - and why.
Acc. Chem. Res. 44, 227-237.

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

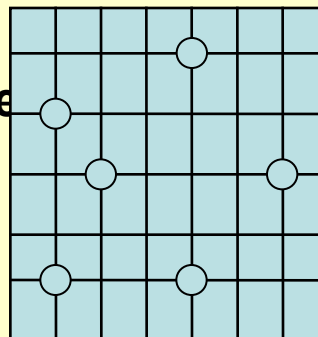
ONE of the continuing scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from a knowledge of their chemical composition. Who, for example, would guess that graphite, not diamond, is the thermodynamically stable allotrope 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.

Перебор всех структур невозможен

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



N _{атомов}	Вариантов	Время
1	1	1 sec.
10	10 ¹¹	10 ³ yrs.
20	10 ²⁵	10 ¹⁷ yrs.
30	10 ³⁹	10 ³¹ yrs.

RESEARCH NEWS

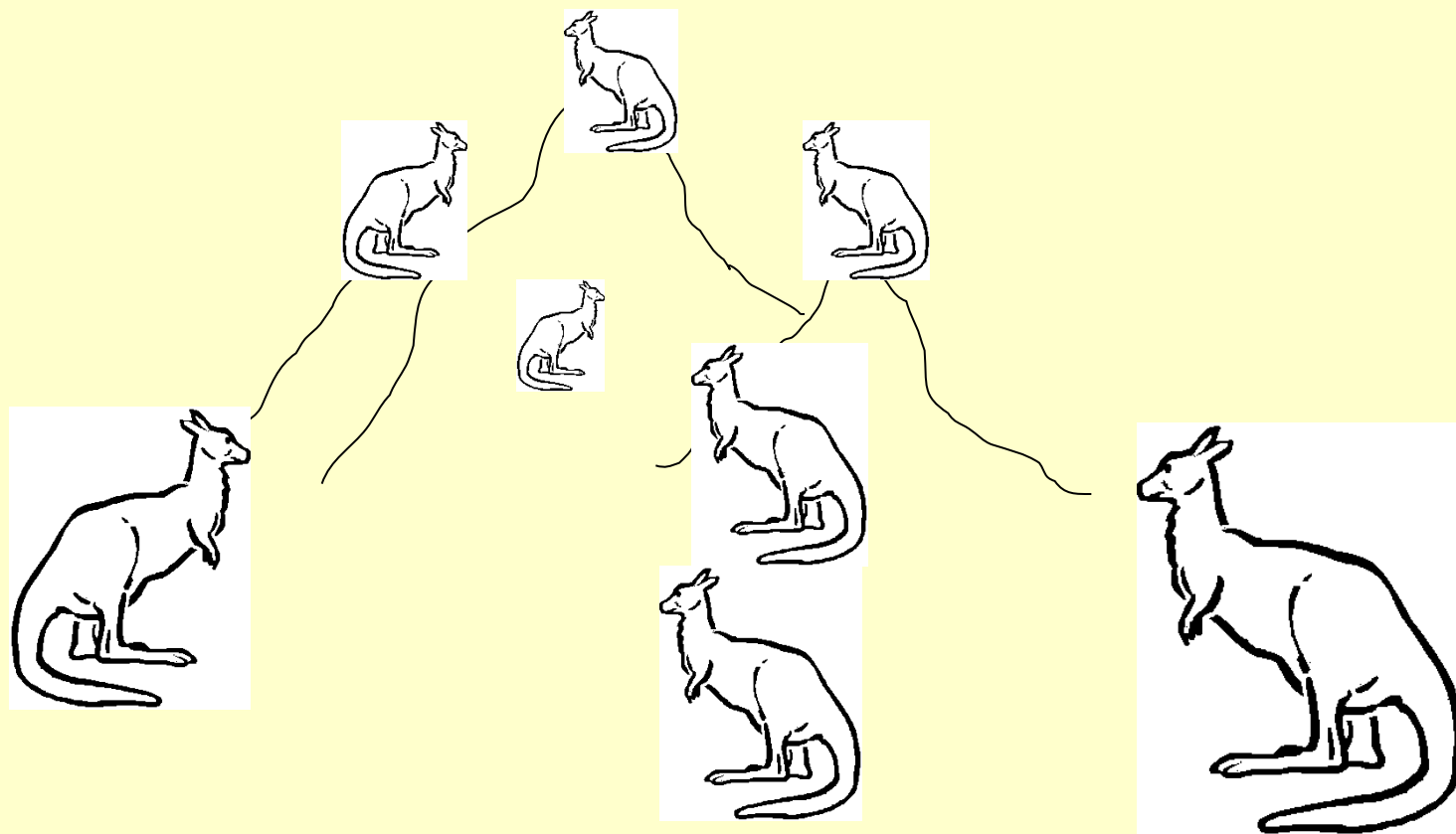
Crystal structure prediction – evolutionary or revolutionary crystallography?

S. L. Chaplot and K. R. Rao

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

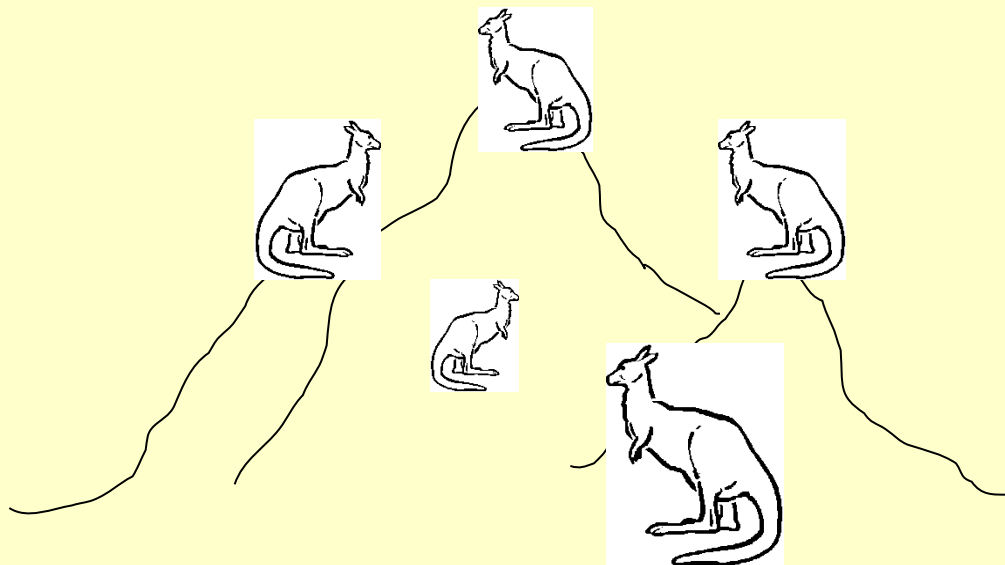
Обзор метода USPEX
(ARO & Glass,
J.Chem.Phys. 2006)

Как с помощью эволюции кенгуру найти гору Эверест? (картинка от Р.Клегга)

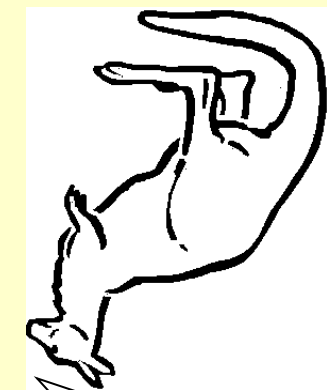


Мы высаживаем десант кенгуру и позволяем им размножаться (не показано по цензурным соображениям).....

Как с помощью эволюции кенгуру найти гору Эверест? (картинка от Р.Клегга)



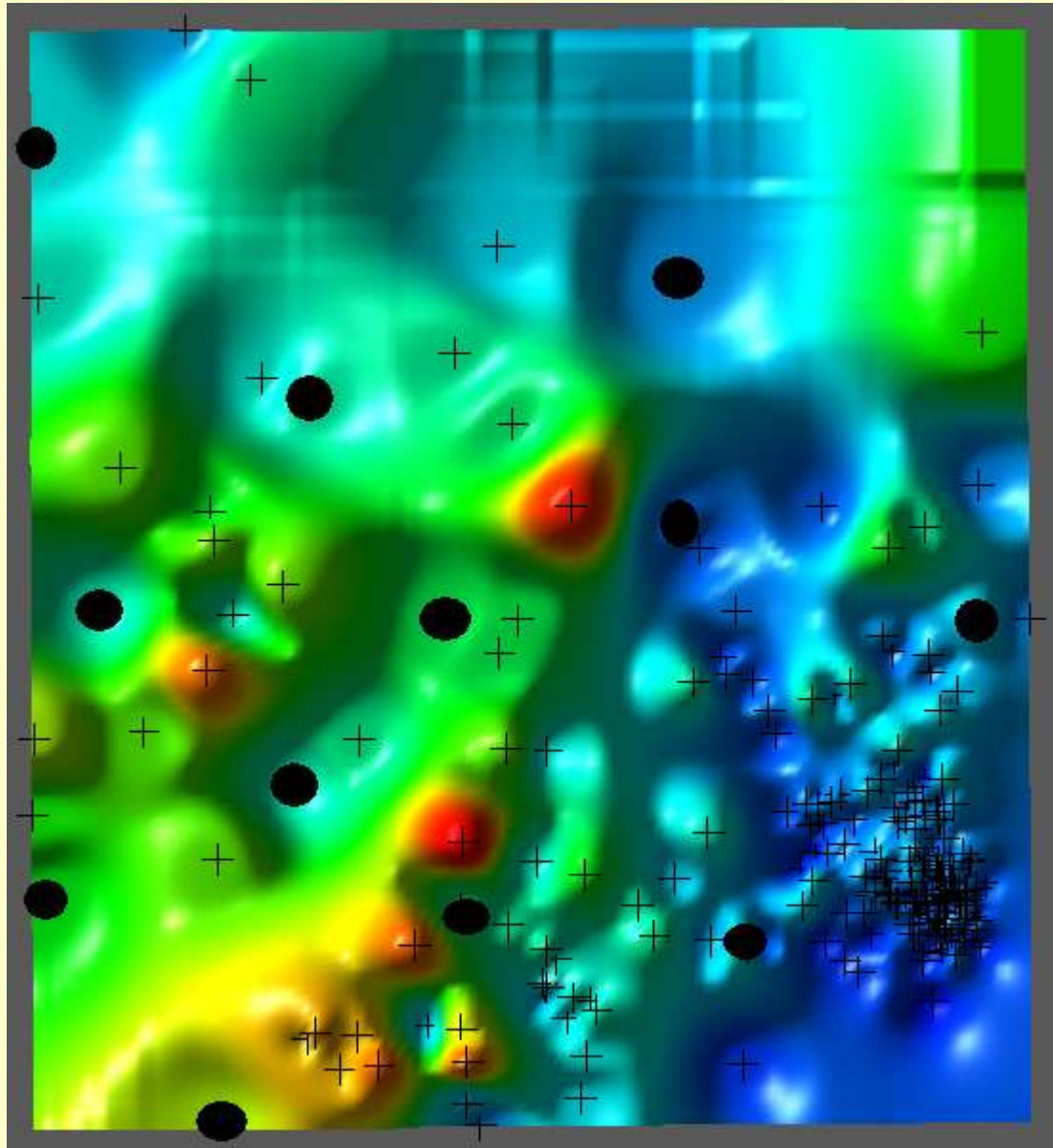
Aaaargh
!



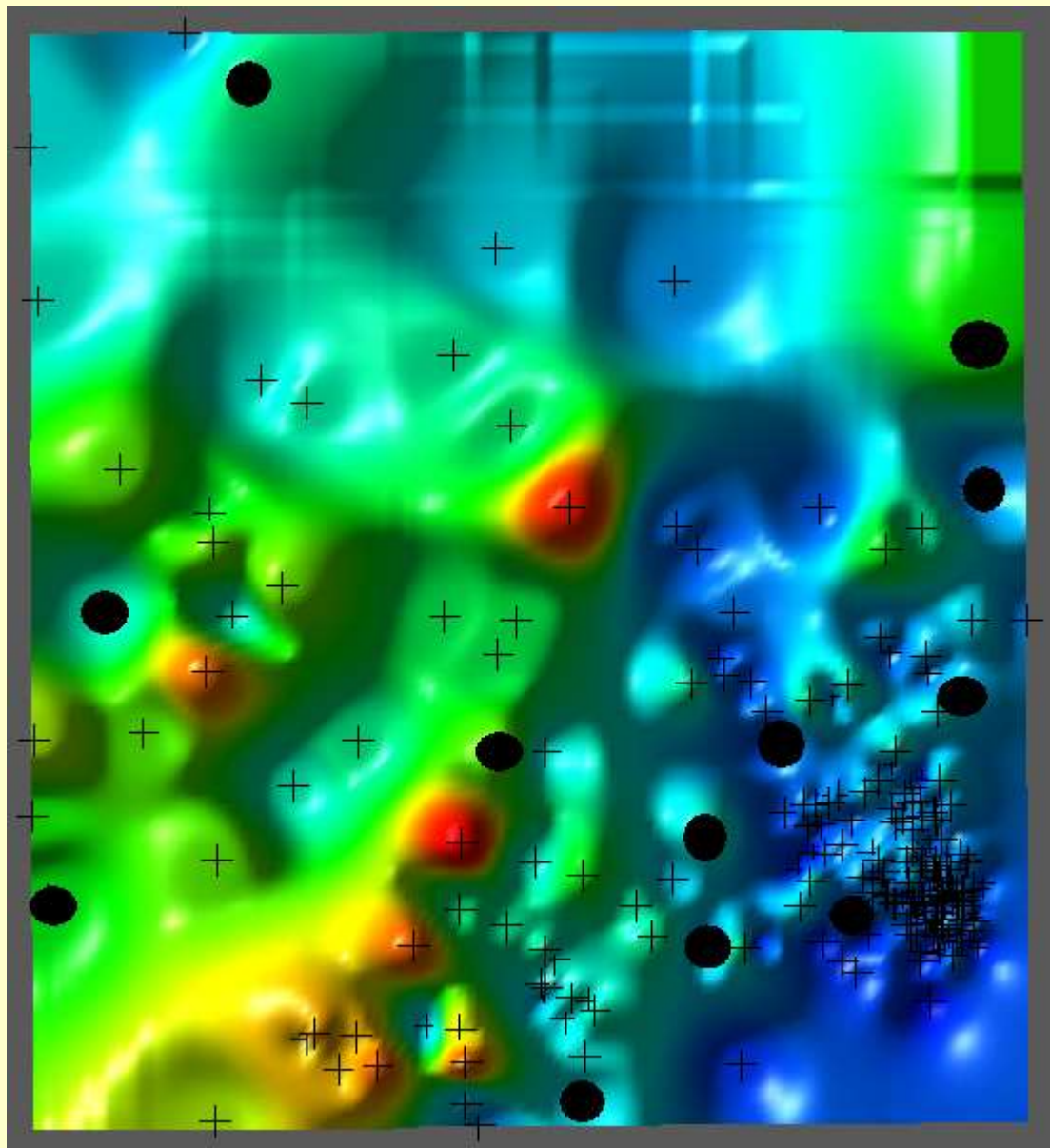
Ouch

....а время от времени приходят охотники и удаляют кенгуру на меньших высотах

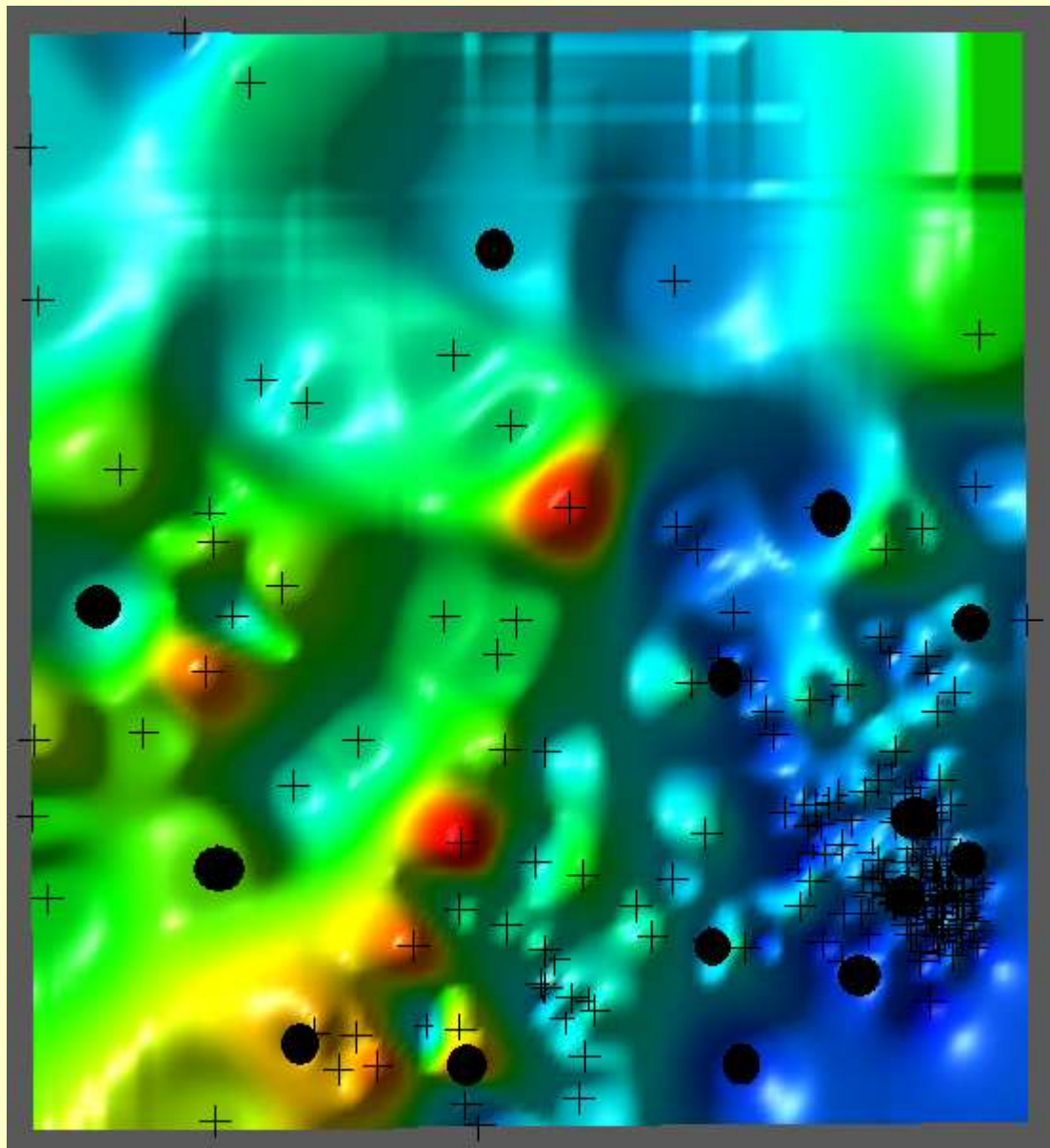
**Эволюционные расчеты «самообучаются» и фокусируют
поиск на наиболее интересных областях пространства**



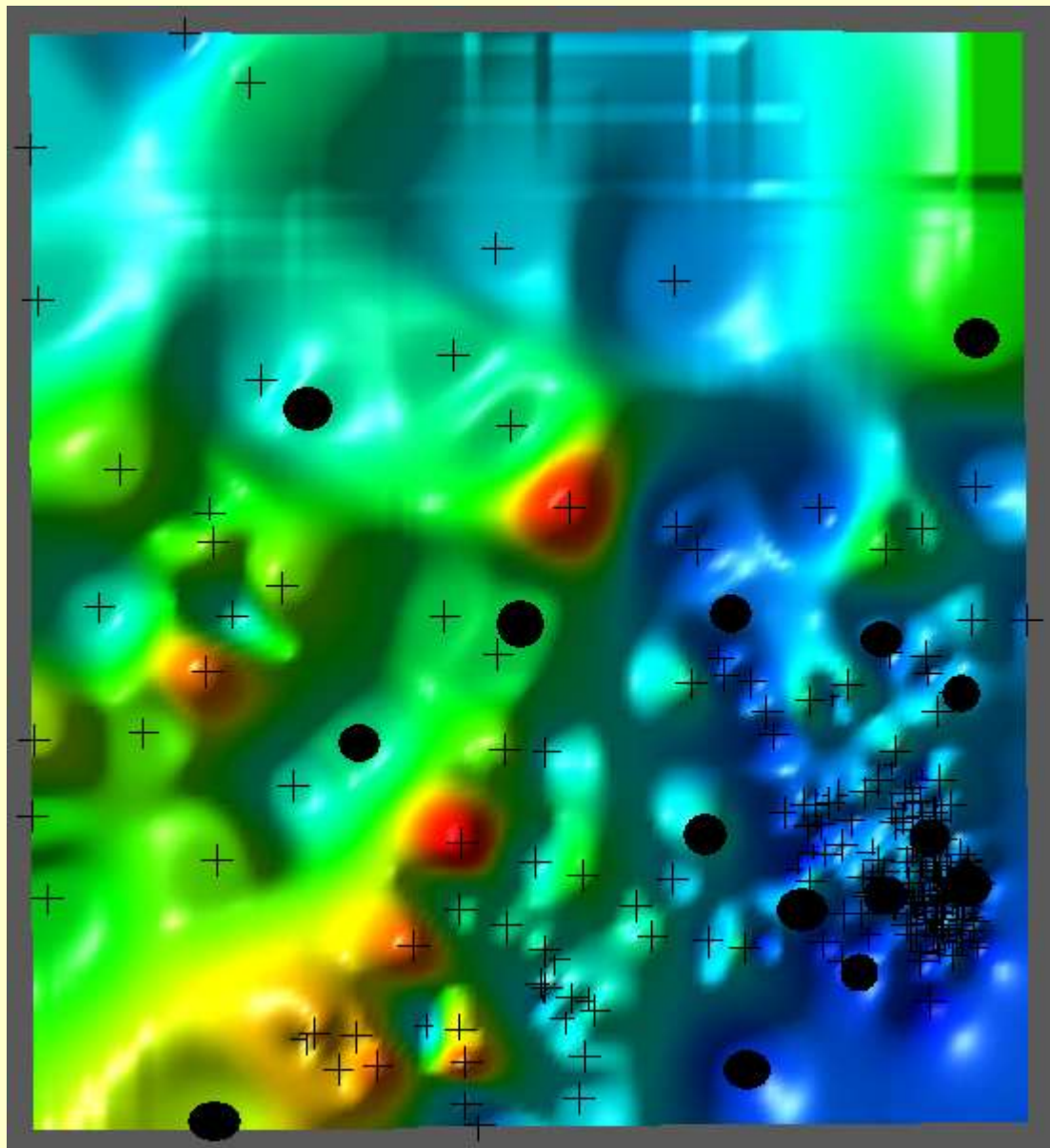
**Эволюционные расчеты «самообучаются» и фокусируют
поиск на наиболее интересных областях пространства**



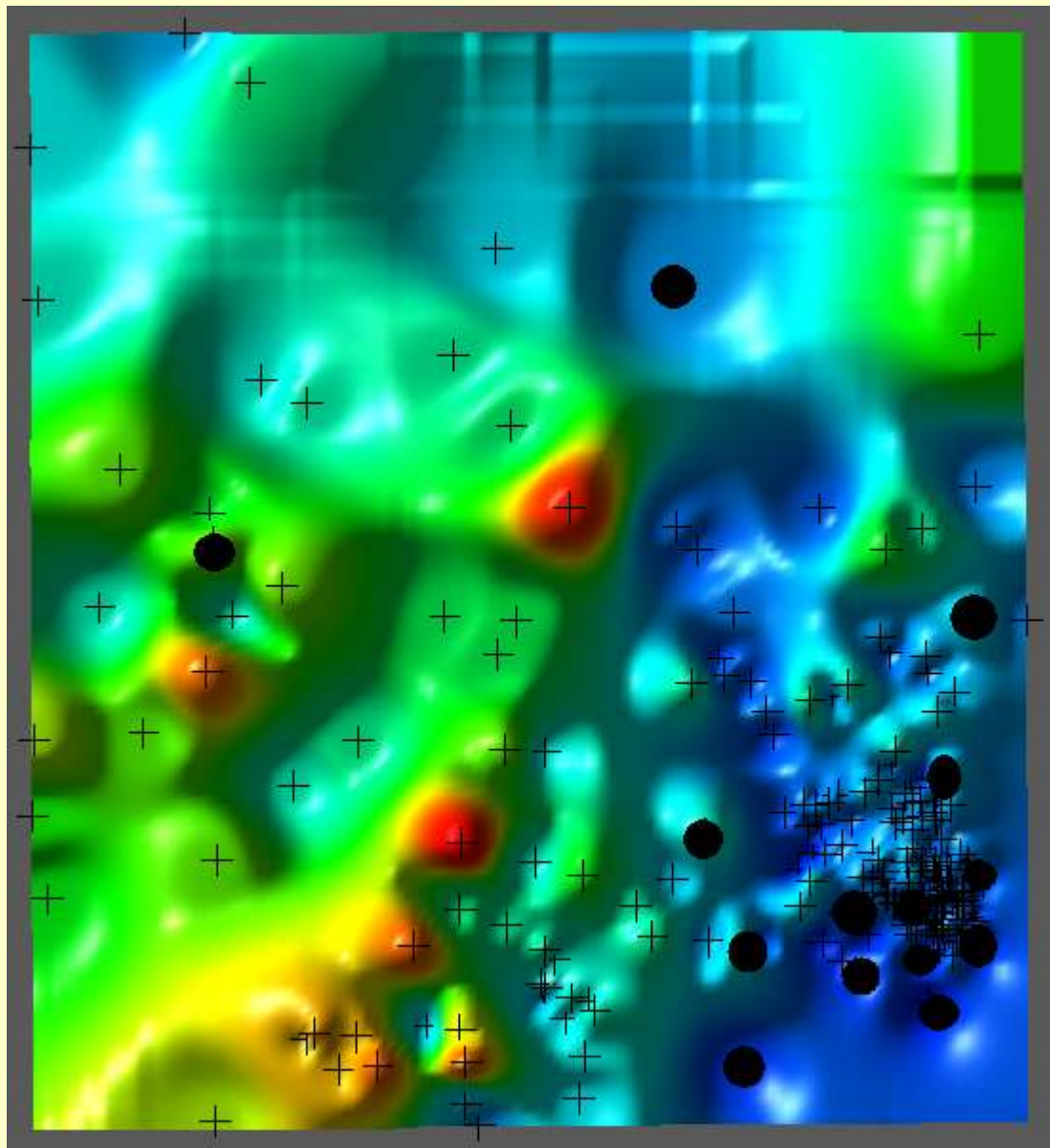
Эволюционные расчеты «самообучаются» и фокусируют поиск на наиболее интересных областях пространства



Эволюционные расчеты «самообучаются» и фокусируют поиск на наиболее интересных областях пространства



Эволюционные расчеты «самообучаются» и фокусируют поиск на наиболее интересных областях пространства



Альтернативные методы:

Случайный поиск

(Freeman & Catlow, 1992; van Eijck & Kroon, 2000; Pickard & Needs, 2006)

- Нет «обучения», работает только для простых систем (до 10-12 атомов).

Искусственный отжиг (Pannetier 1990; Schön & Jansen 1996)

- Нет «обучения»

Метадинамика (Martonak, Laio, Parrinello 2003)

- Табу-поиск в пространстве уменьшенной размерности

$$G^t(\mathbf{h}) = G(\mathbf{h}) + \sum_{t' < t} W e^{-\frac{|\mathbf{h} - \mathbf{h}^{t'}|^2}{2\delta h^2}}$$

$$\mathbf{h}^{t+1} = \mathbf{h}^t + \delta h \frac{\phi^t}{|\phi^t|}$$

Minima hopping (Gödecker 2004)

- Использует историю расчета и «самообучение».

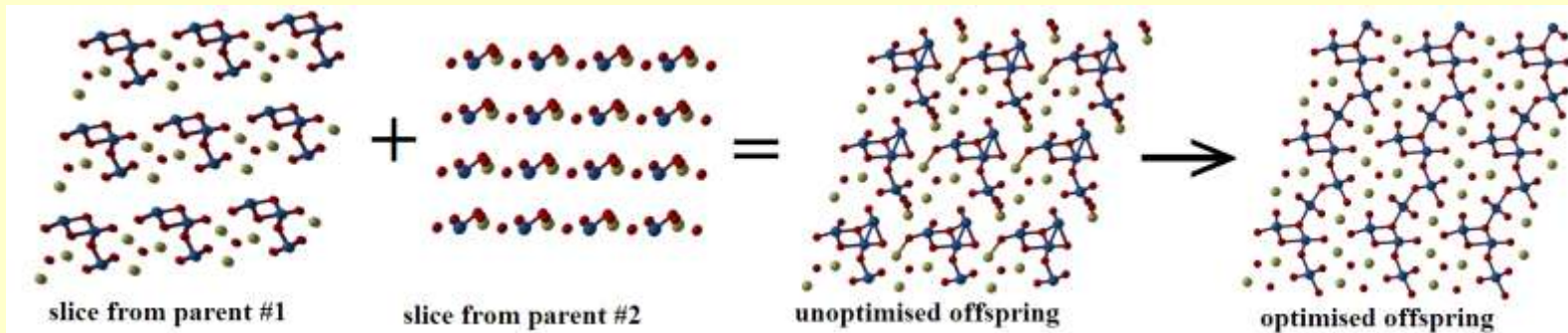
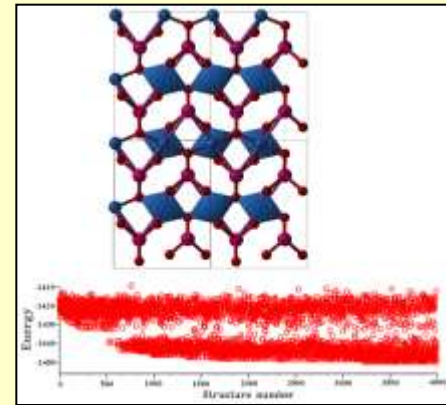
Генетические и эволюционные алгоритмы

- Bush (1995), Woodley (1999) – неэффективный метод для кристаллов.
- Deaven & Ho (1995) – эффективный метод для наночастиц.

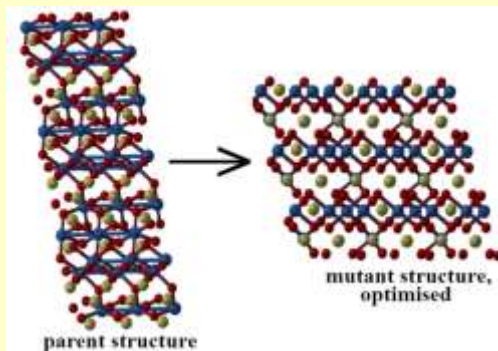
USPEX

(Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography)

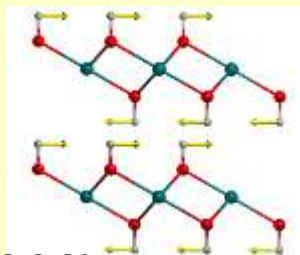
- (Случайная) начальная популяция
- Новое поколение структур производится только из лучших текущих структур



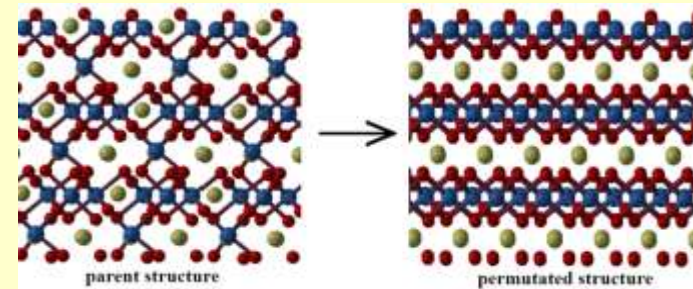
(1) Наследственность



(2) Мутация решетки

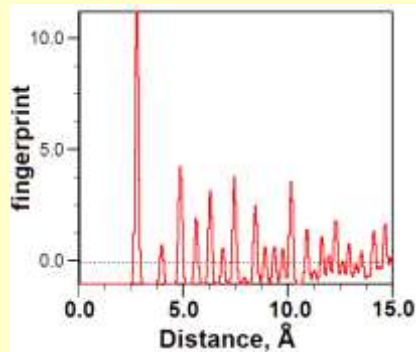


(3) Координатная мутация



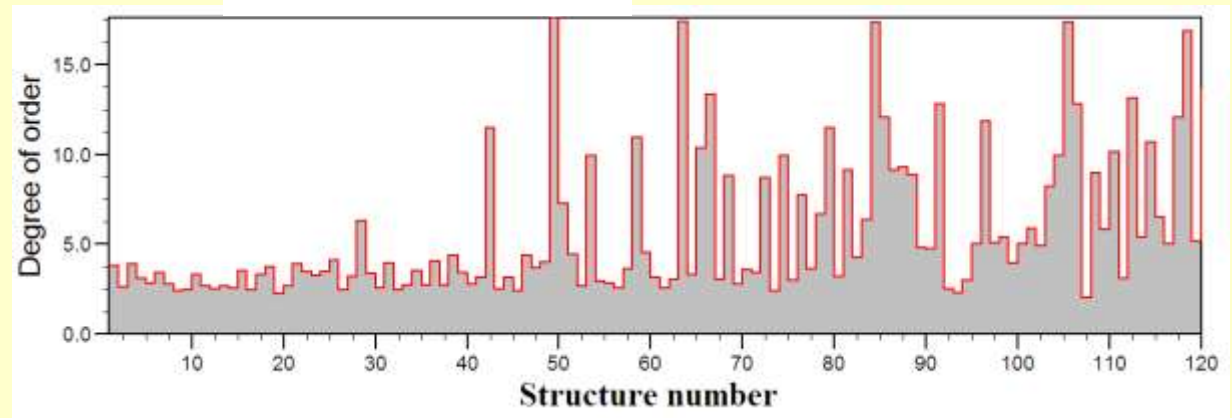
(4) Пермутация

Дополнительные приемы



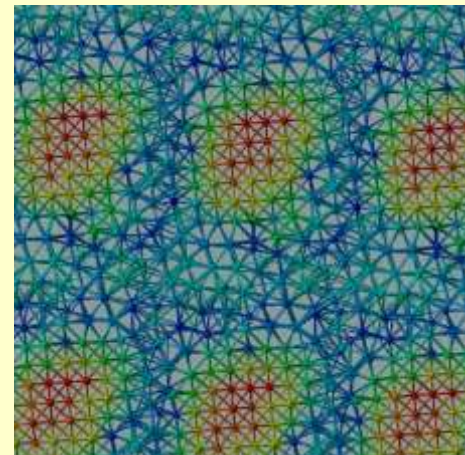
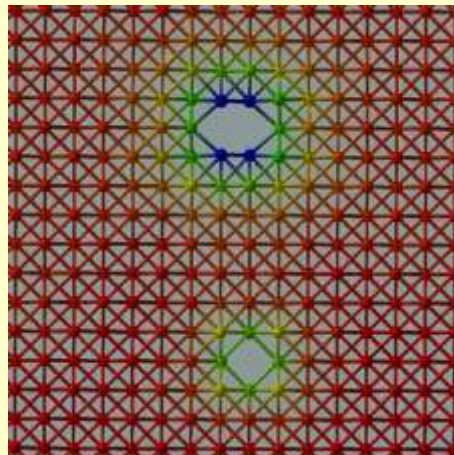
«Отпечаток пальцев»
структуры

$$\Pi = \frac{1}{V^{1/3}} \int_0^{\infty} f^2 dR \quad \text{- параметр порядка}$$



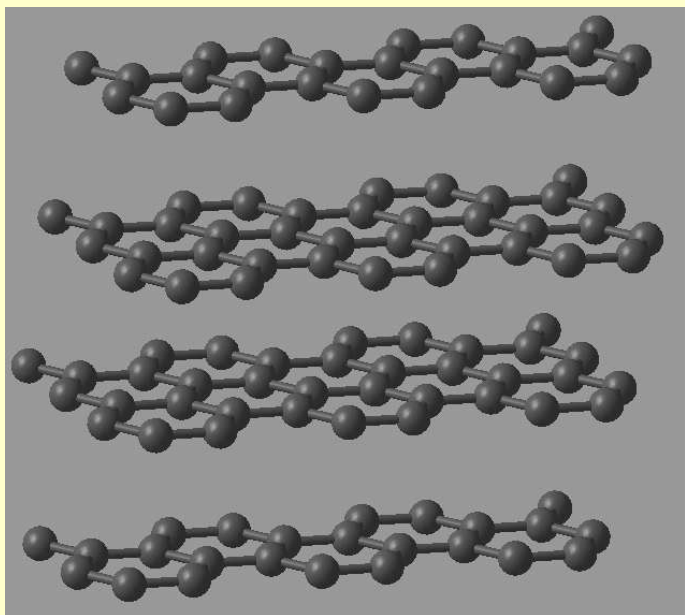
Рождение порядка из хаоса в эволюционном процессе
[«GOD = Generator Of Diversity» © С.Аветисян]

Локальный порядок –
указывает дефектные области

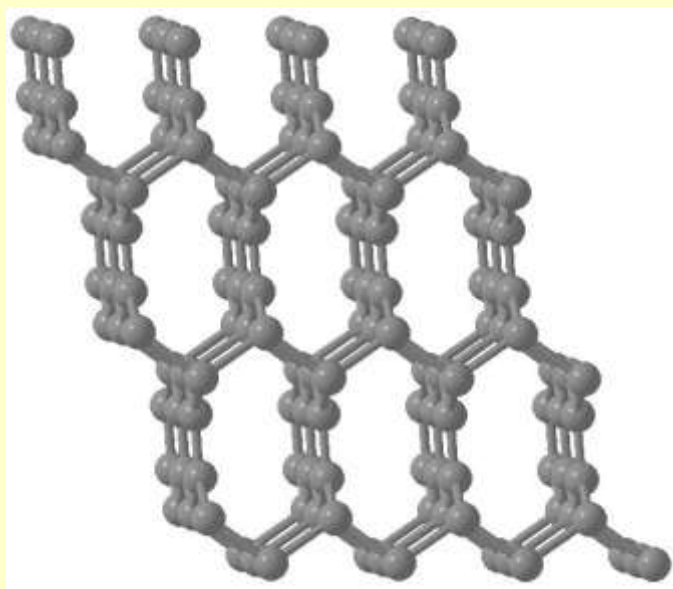


[ARO & Valle (2009), Lyakhov et al. (2010)]

Тест: „Who would guess that graphite is the stable allotrope of carbon at ordinary pressure?“ (Maddox, 1988)

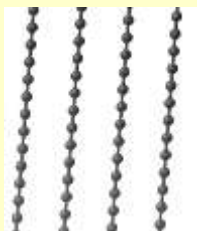


Графит корректно предсказан как устойчивая фаза при 1 атм

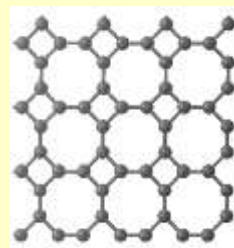


Трехмерная sp^2 структура, предложенная Р. Хоффманном (1983)

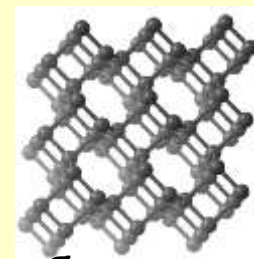
Структуры с низкой энергией иллюстрируют химию углерода



sp -гибридизация
(карбин)



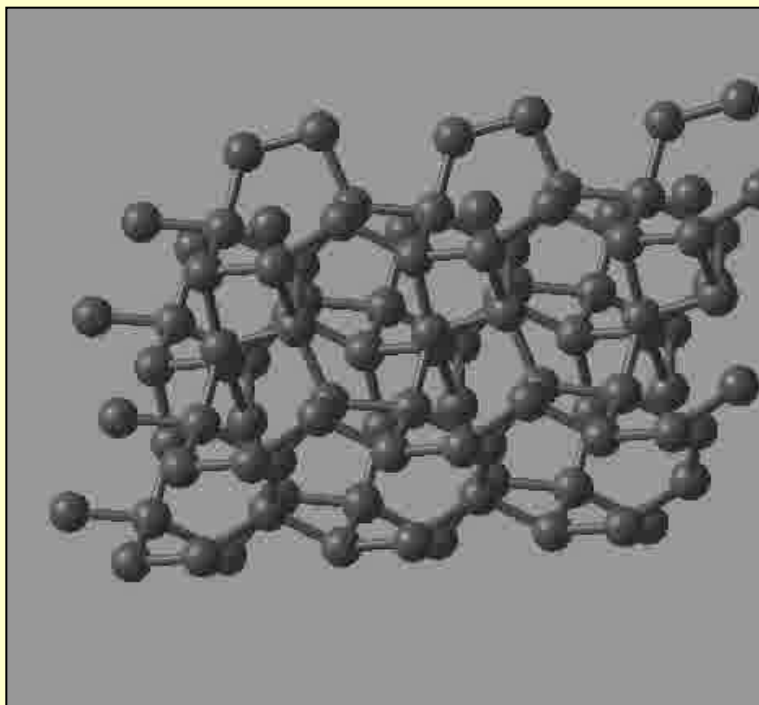
sp^2 -гибридизация



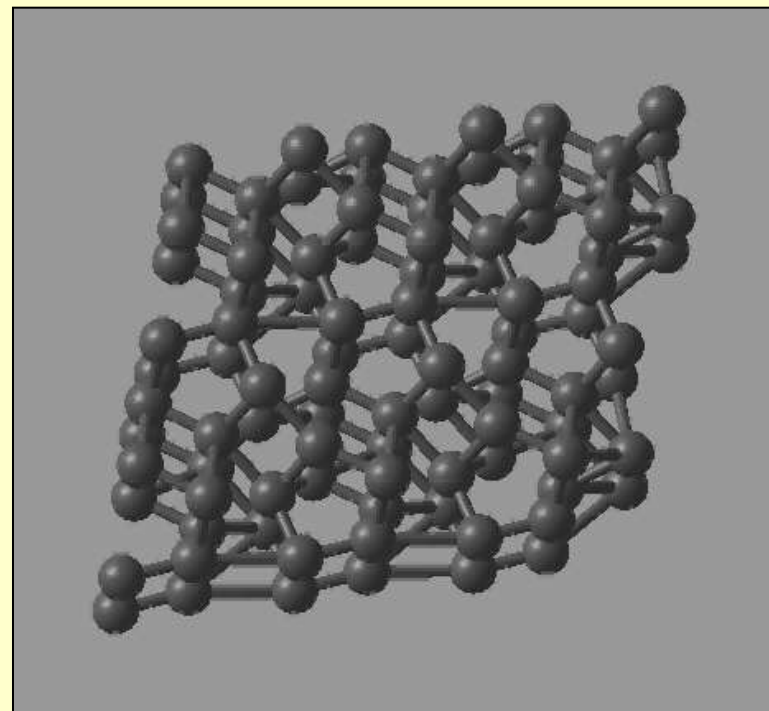
sp^3 -гибридизация

[ARO & Glass, J.Chem.Phys. (2006)]

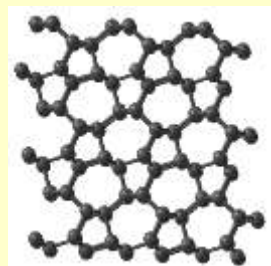
Тест: Фазы высокого давления также воспроизводятся правильно



100 ГПа: алмаз устойчив



2000 ГПа: bc8 фаза устойчива

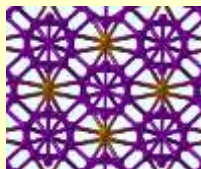


+ найдена метастабильная фаза, объясняющая «сверхтвёрдый графит»
(Li, ARO, Ma, et al., PRL 2009)

Метастабильная bc8 фаза кремния известна (Kasper, 1964)

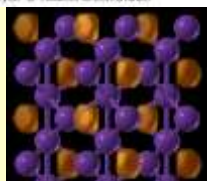
[ARO & Glass, J.Chem.Phys. (2006)]

Открытия, сделанные с USPEXом:



Ionic high-pressure form of elemental boron

Artem R. Oganov^{1,2}, Juhua Chen^{3,4}, Carlo Gatti⁵, Yancheng Ma⁶, Yanning Ma^{1,2}, Colin W. Glass¹, Thorsten Liu⁷, Tony Yu¹, Oleksandr G. Karskyevich⁸ & Vladimir L. Solodovnikov⁹



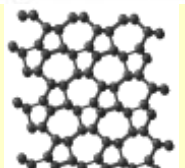
Transparent dense sodium

Yanning Ma^{1,2}, Mihail Eremets³, Artem R. Oganov^{1,2}, Yu Xie¹, Ivan Tsvetkov⁴, Sergey Medvedev⁵, Andrey O. Lyubkov⁶, Nuno Vinho⁷ & Václav Proszkewski⁸



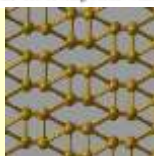
Novel High Pressure Structures of Polymeric Nitrogen

Yanning Ma^{1,2,3}, Artem R. Oganov^{1,2}, Zhenwei Li¹, Yu Xie¹ and Jari Korkko⁴



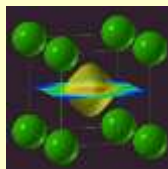
Superhard Monoclinic Polymorph of Carbon

Quan Li¹, Yanning Ma^{1,2}, Artem R. Oganov^{1,2,3}, Hongbo Wang¹, Hui Wang¹, Yang Xu¹, Tian Cai¹, Ho-Kwang Mao⁴ and Guangtian Zou¹



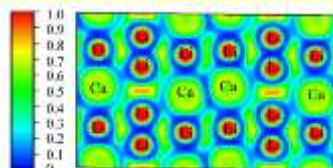
Structure of the metallic ξ-phase of oxygen and isosymmetric nature of the ε-ξ phase transition: *Ab initio* simulations

Yanning Ma^{1,2}, Artem R. Oganov^{1,2,3} and Colin W. Glass¹



Exotic behavior and crystal structures of calcium under pressure

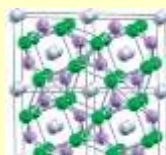
Artem R. Oganov^{1,2}, Yanning Ma¹, Ying Xu¹, Ian Ermi^{3,4}, Aitor Bergara^{5,6}, and Andrey O. Lyubkov⁷



PRL 104, 177005 (2010) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 30 APRIL 2010

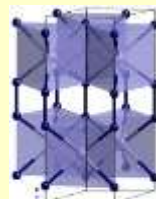
Novel High Pressure Structures and Superconductivity of CaLi₂

Yu Xie^{1,2}, Artem R. Oganov^{2,3} and Yanning Ma¹⁻⁶



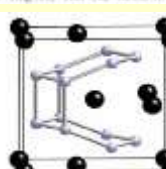
A little bit of lithium does a lot for hydrogen

Rui Zou^{1,2}, David Hoffmann³, R. W. Johnson⁴, Artem R. Oganov⁵, and Andrey O. Lyubkov⁶



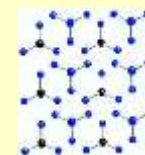
Ultra-incompressible phases of tungsten dinitride predicted from first principles

Hui Wang¹, Quan Li¹, Yanning Ma¹, Ying Xu¹, Tian Cai¹, Artem R. Oganov^{1,2} and Yanning Ma¹⁻⁶



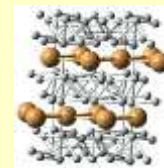
Absence of superconductivity in the high-pressure polymorph of MgB₂

Yanning Ma^{1,2,3}, Yanchao Wang¹ and Artem R. Oganov^{1,2}



Dissociation of methane under high pressure

Guoying Gao¹, Artem R. Oganov^{2,3,*}, Yanning Ma^{1,4}, Hui Wang¹, Peifang Li¹, Tian Cai¹, Guangtian Zou¹



PRL 102, 087005 (2009) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 27 FEBRUARY 2009

Novel Structures and Superconductivity of Silane under Pressure

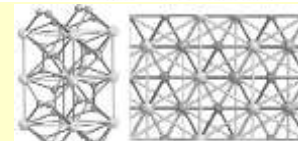
Miguel Martínez-Camde^{1,2}, Artem R. Oganov^{3,4}, Yanning Ma², Yan Yan⁵, Andrey O. Lyubkov⁶ and Aitor Bergara^{1,2,3,4}



PRL 101, 107002 (2008) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 5 SEPTEMBER 2008

Superconducting High Pressure Phase of Germane

Guoying Gao¹, Artem R. Oganov^{2,3}, Aitor Bergara^{4,5}, Miguel Martínez-Camde^{4,5}, Tian Cai¹, Toshiki Inaka⁶, Yanning Ma^{1,2,3,4} and Guangtian Zou¹



High-pressure crystal structures and superconductivity of Stannane (SnH₄)

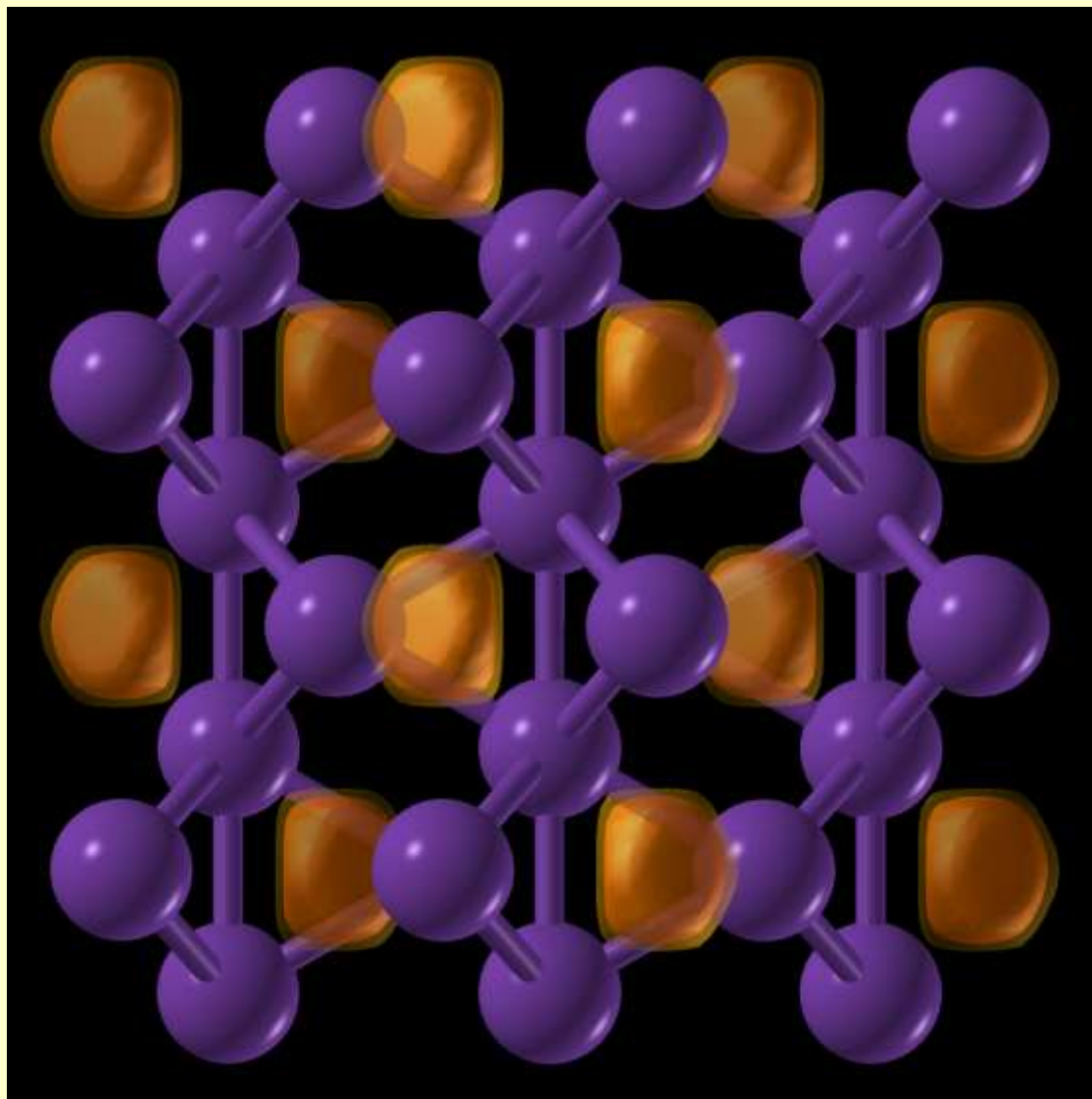
Yanning Ma¹, Artem R. Oganov², Peifang Li¹, Hui Wang¹, Tian Cai¹, Yanning Ma¹, Aitor Bergara^{3,4}, Andrey O. Lyubkov⁵, Toshiki Inaka⁶, and Guangtian Zou¹



High-pressure phases of CaCO₃: Crystal structure prediction and experiment

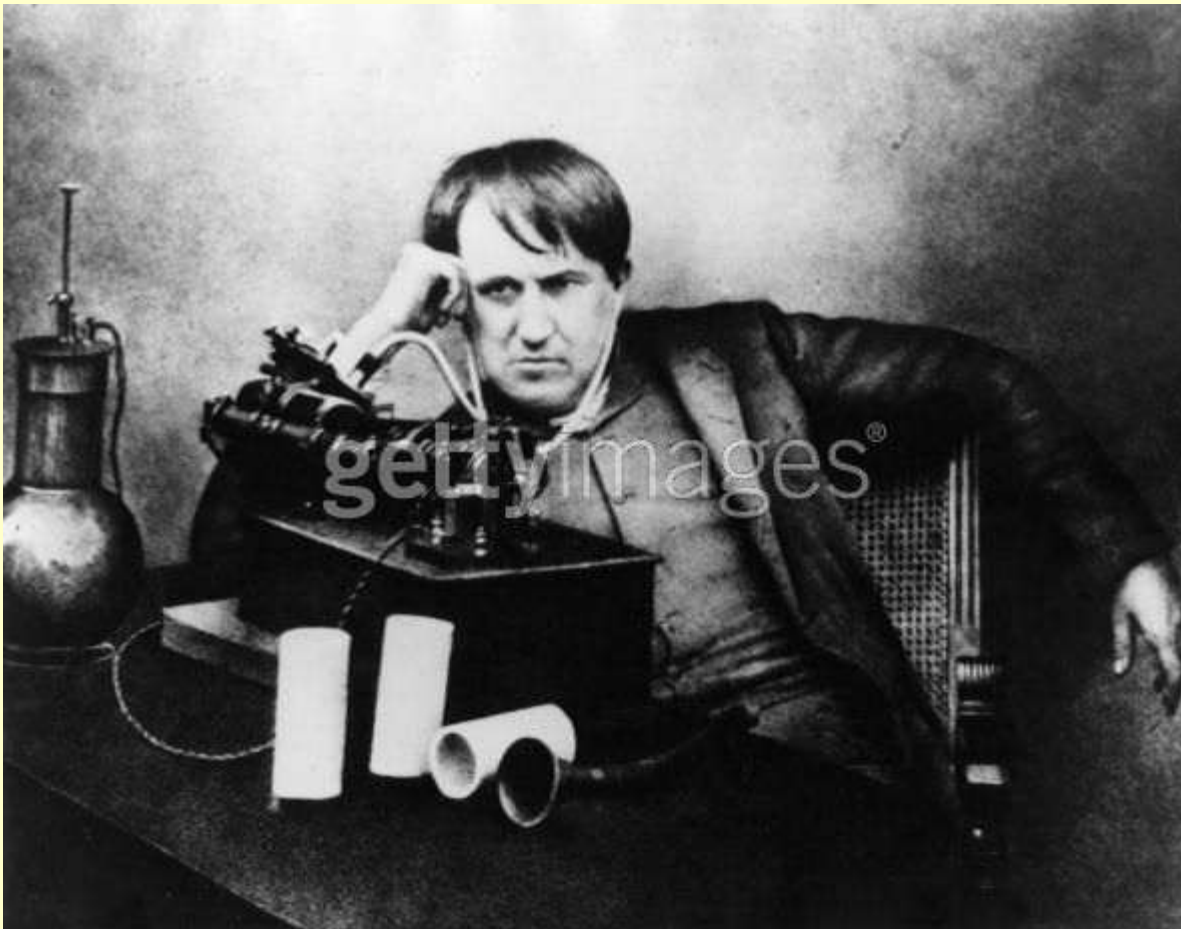
Artem R. Oganov^{1,2}, Peter W. Glass³, Shigehiko Ono⁴

3. Материалы из компьютера

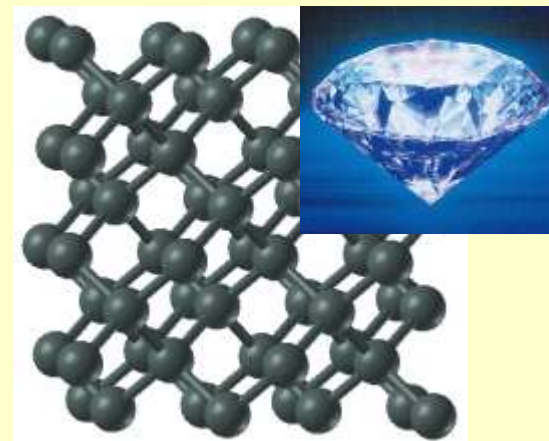
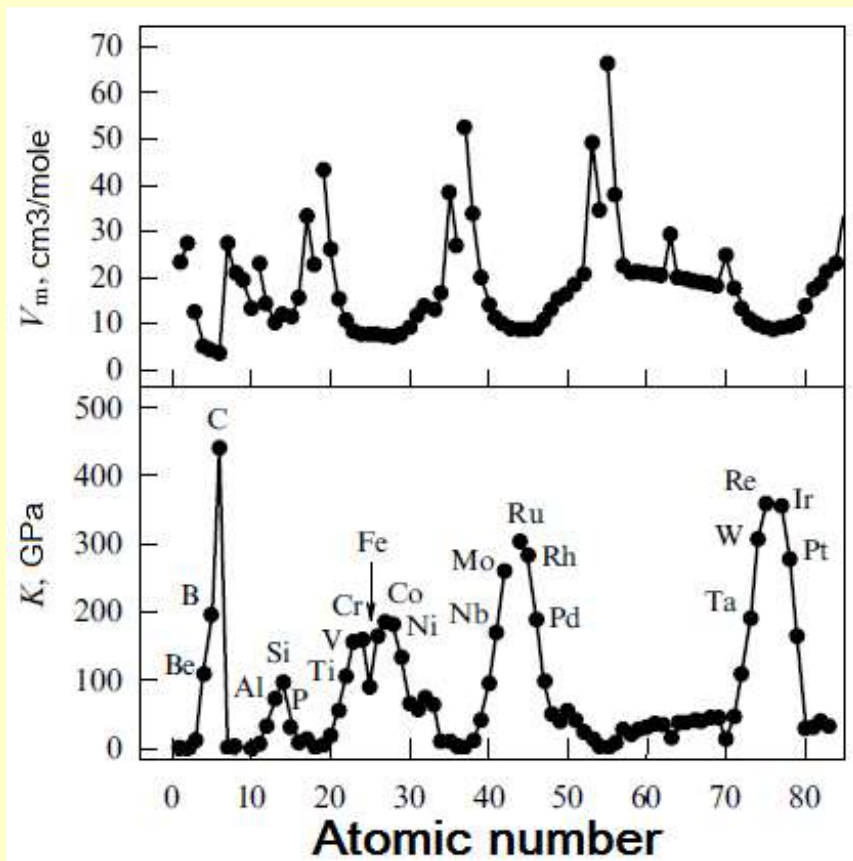


Открытие новых материалов: все еще экспериментальный метод проб и ошибок

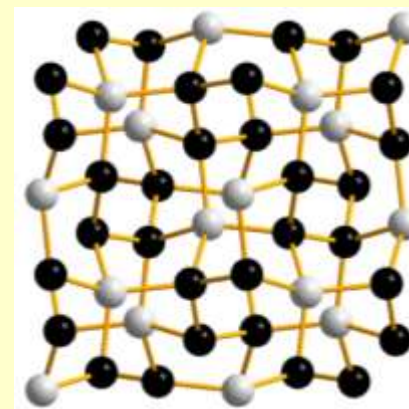
*«Я не потерпел (десять тысяч) неудач, а лишь открыл 10000
неработающих способов»* (Т.А. Эдисон)



Поиск самого плотного вещества: возможны ли модификации углерода плотнее алмаза? Да



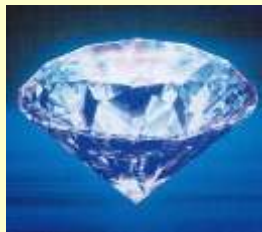
Структура алмаза



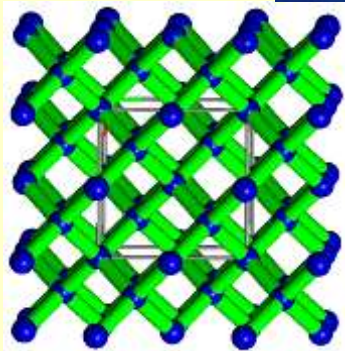
Новая структура,
плотнее алмаза!
(Zhu, ARO, et al., 2011)

Алмаз обладает наименьшим атомным объемом и наибольшей несжимаемостью среди всех элементов (и соединений).

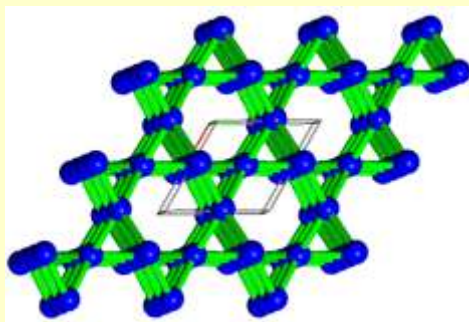
Аналогия форм углерода и кремнезема (SiO_2) позволяет понять плотность новых форм углерода



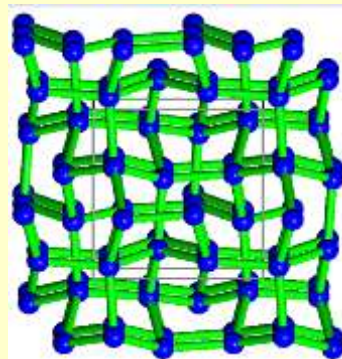
Новые структуры, 1.1-3.2% плотнее алмаза, очень высокие (до 2.8!) показатели преломления и дисперсия света



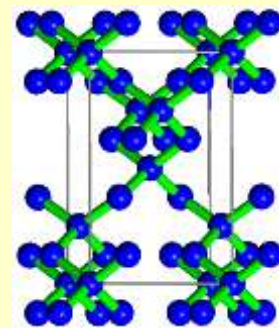
алмаз



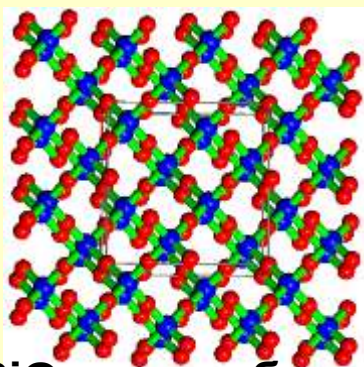
hP3 структура



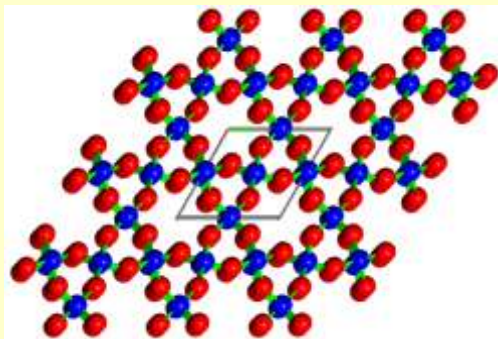
tP12 структура



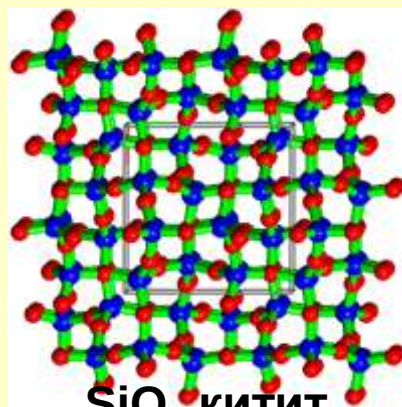
tI12 структура



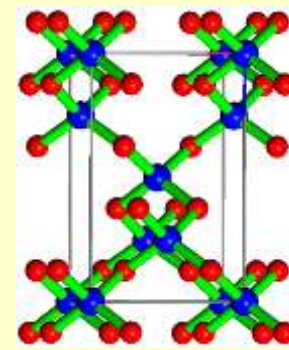
SiO_2 кристобалит



SiO_2 кварц



SiO_2 китит

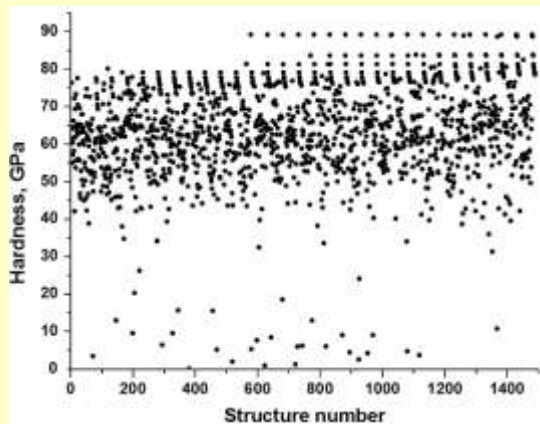


фаза SiS_2 высокого давления

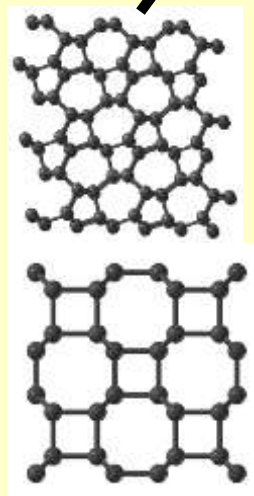
Возможны ли формы углерода тверже алмаза? Нет [Lyakhov & ARO, 2011].

Материал	Модель Li et al. (2009)	Lyakhov & ARO (2011)	Эксп.
Алмаз	91.2	89.7	90
Графит	57.4	0.17	0.14
TiO ₂ рутил	12.4	12.3	8-10
β -Si ₃ N ₄	23.4	23.4	21
SiO ₂ стишовит	31.8	30.8	33

Структура	Твердость, ГПа	Энтальпия, эВ/атом
Алмаз	89.7	0.000
Лонсдейлит	89.1	0.026
<i>C2/m</i>	84.3	0.163
<i>I4/mmm</i>	84.0	0.198
<i>Cmcm</i>	83.5	0.282
<i>P2/m</i>	83.4	0.166
<i>I2₁2₁2₁</i>	82.9	0.784
<i>Fmmm</i>	82.2	0.322
<i>Cmcm</i>	82.0	0.224
<i>P6₅22</i>	81.3	0.111



Эволюционный расчет

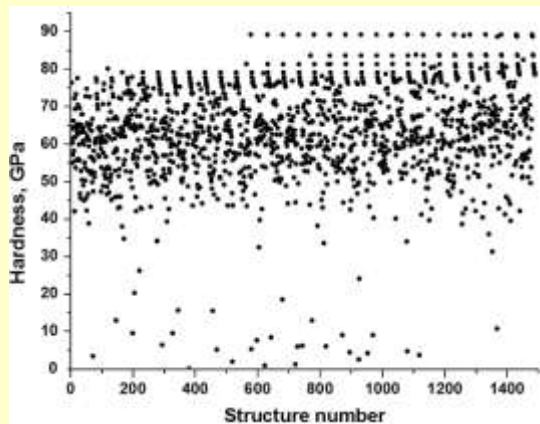


Все самые твердые структуры основаны на sp^3 -гибридизации

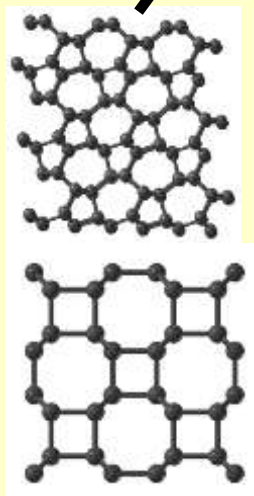
Возможны ли формы углерода тверже алмаза? Нет [Lyakhov & ARO, 2011].

Материал	Модель Li et al. (2009)	Lyakhov & ARO (2011)	Эксп.
Алмаз	91.2	89.7	90
Графит	57.4	0.17	0.14
TiO ₂ рутил	12.4	12.3	8-10
β -Si ₃ N ₄	23.4	23.4	21
SiO ₂ стишовит	31.8	30.8	33

Структура	Твердость, ГПа	Энтальпия, эВ/атом
Алмаз	89.7	0.000
Лонсдейлит	89.1	0.026
<i>C2/m</i>	84.3	0.163
<i>I4/mmm</i>	84.0	0.198
<i>Cmcm</i>	83.5	0.282
<i>P2/m</i>	83.4	0.166
<i>I2₁2₁2₁</i>	82.9	0.784
<i>Fmmm</i>	82.2	0.322
<i>Cmcm</i>	82.0	0.224
<i>P6₅22</i>	81.3	0.111



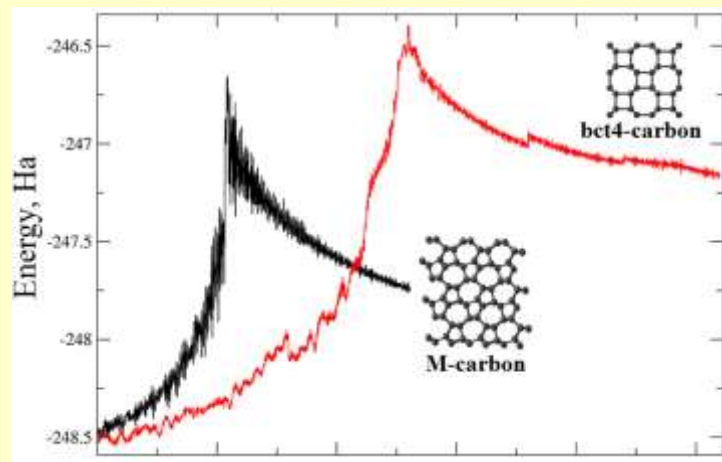
Эволюционный расчет



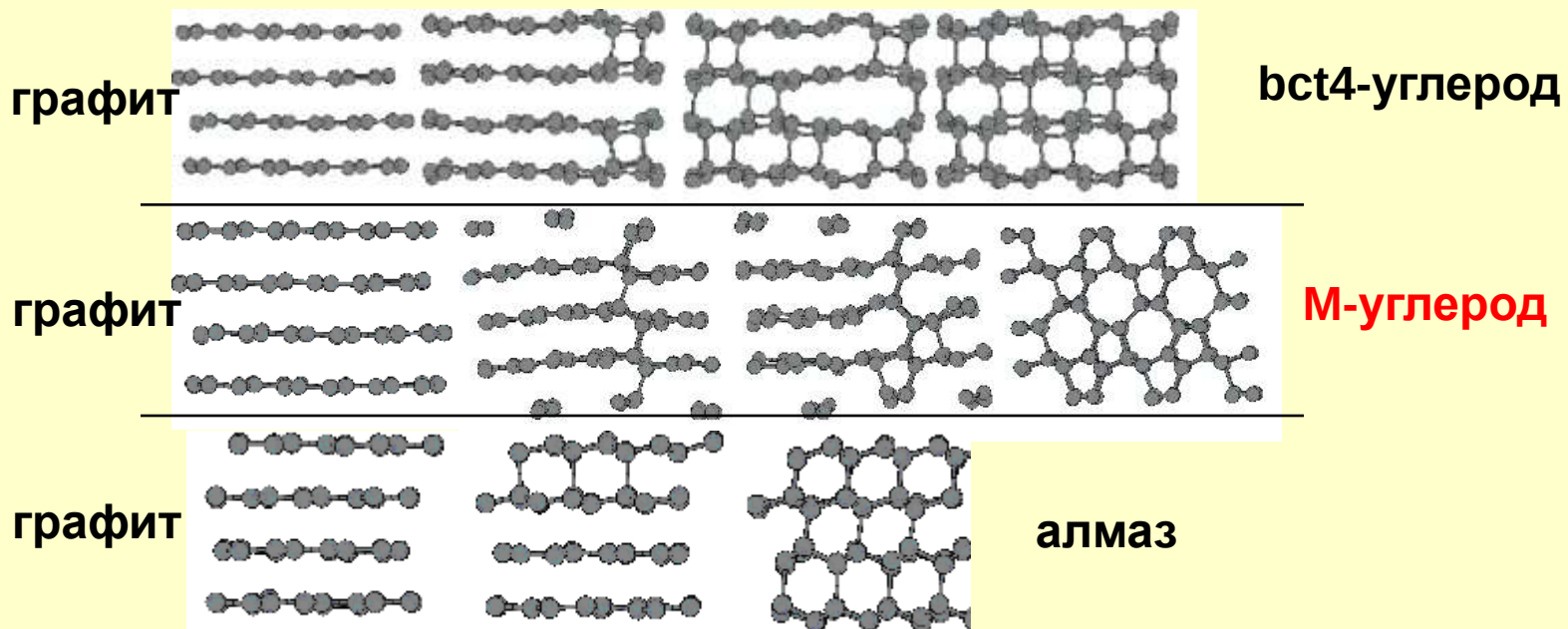
Все самые твердые структуры основаны на sp^3 -гибридизации

Холодное сжатие графита дает М-углерод, а не алмаз!

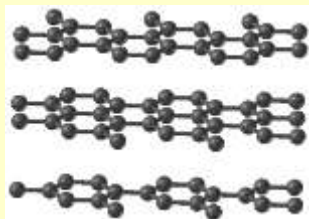
М-углерод подтвержден новейшими экспериментами [Wang et al., 2012]



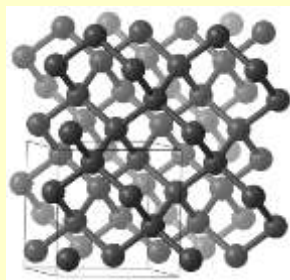
М-углерод легче всего образуется из графита
[Boulfelfel, ARO, Leoni, Sci.Rep., in press]



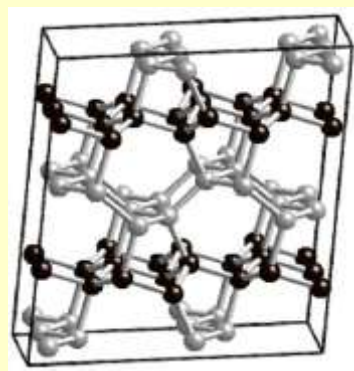
М-углерод - новая форма углерода



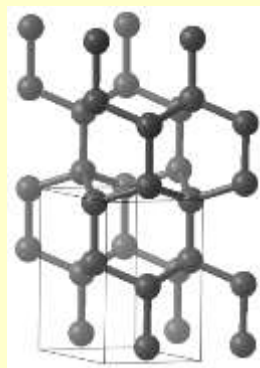
графит



алмаз



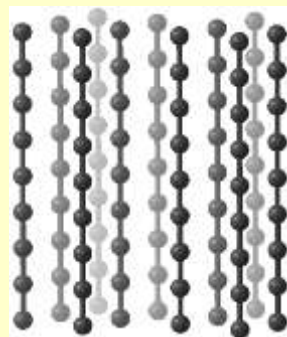
М-углерод



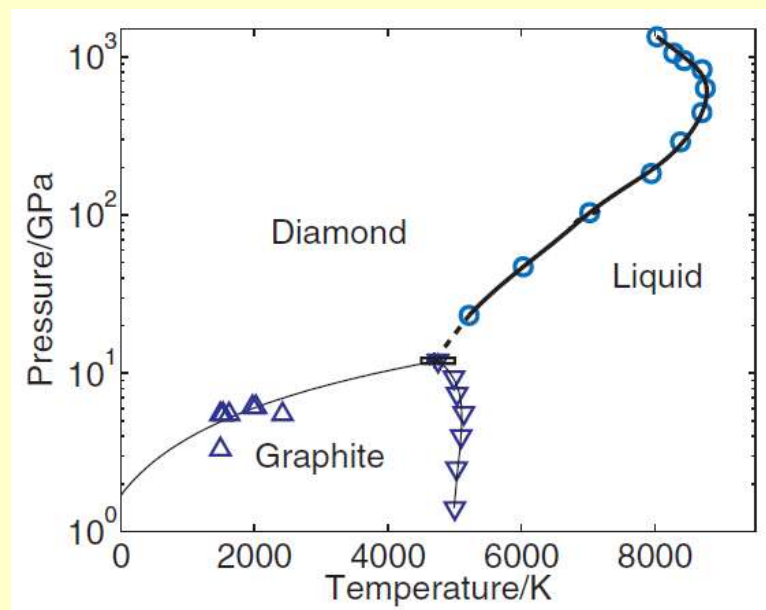
лонсдейлит



фуллерены



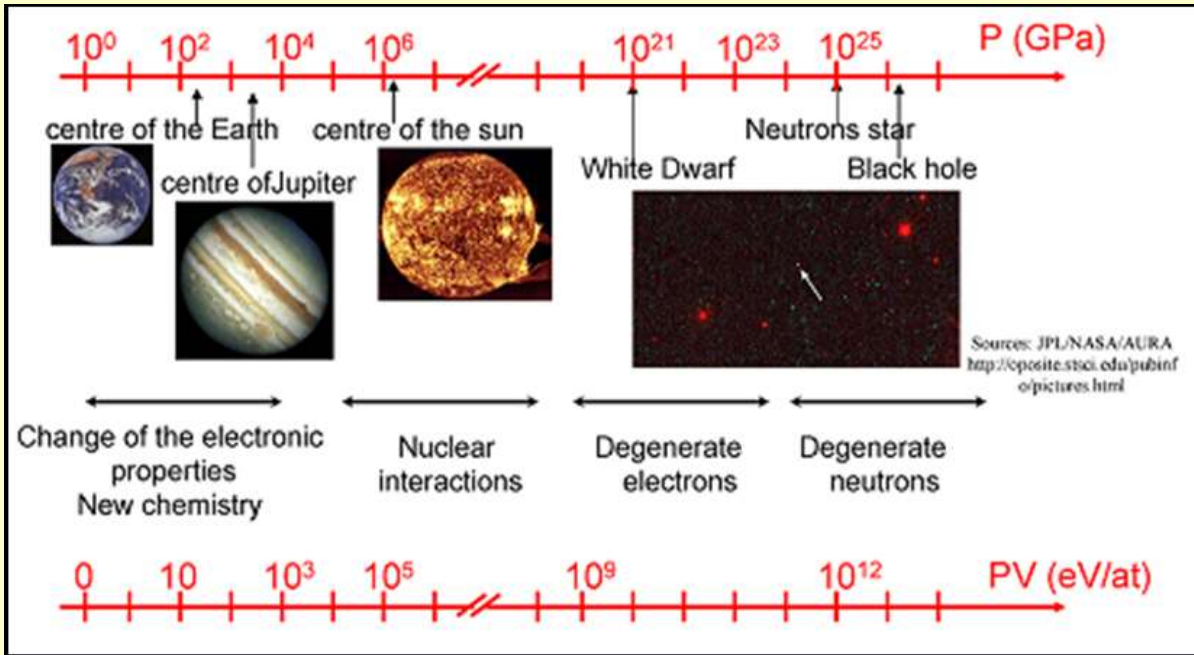
карбины



Теоретическая фазовая
диаграмма углерода
[Wang et al. (2005)]



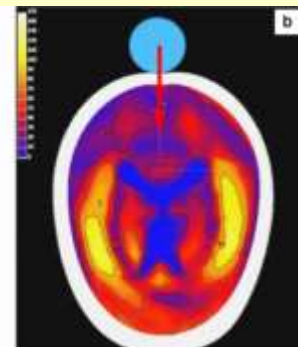
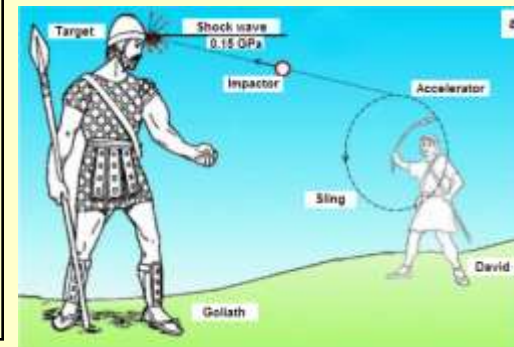
Вещество под давлением в природе



P.W. Bridgman
1946 Нобелевский лауреат (Физика)

Масштаб: 100 ГПа = 1 Мбар =

200x



Нептун имеет внутренний источник тепла – но откуда?

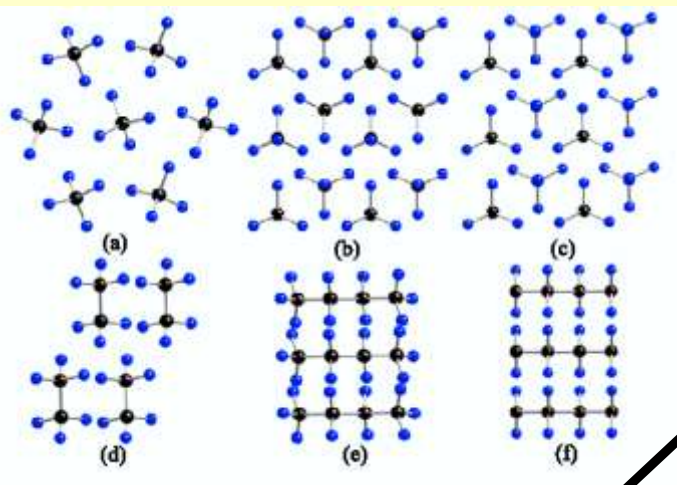
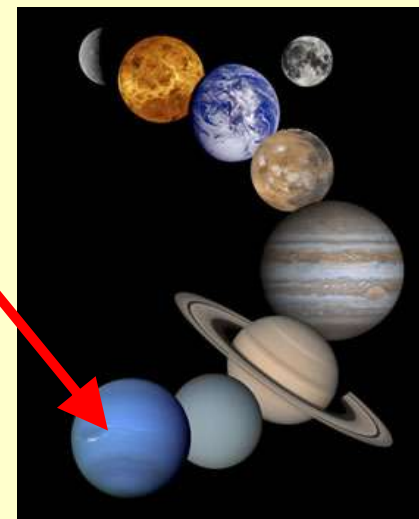
CH₄

- Уран и Нептун: H₂O:CH₄:NH₃ = 59:33:8.
- У Нептуна есть внутренний источник энергии (Hubbard'99).

- Ross'81 (и Benedetti'99):

CH₄=C(алмаз) + 2H₂. Падение алмаза – основной источник тепла на Нептуне?

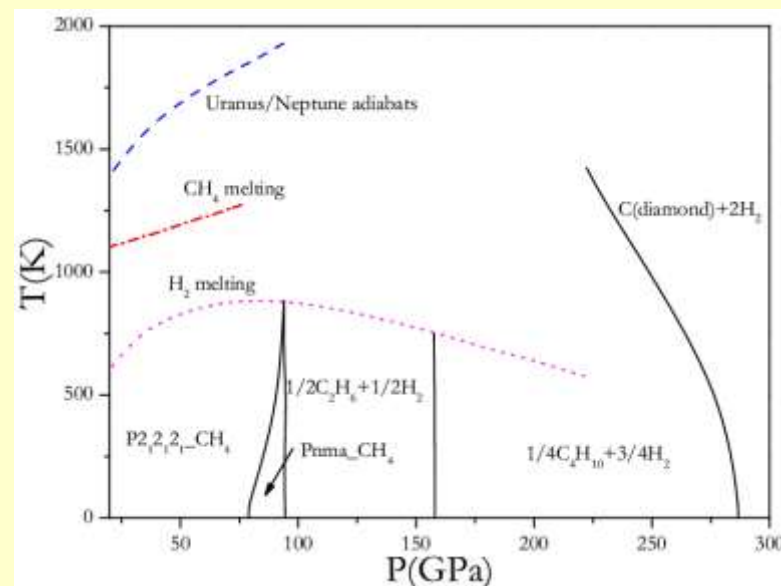
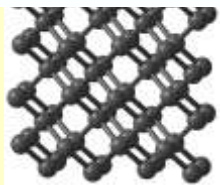
- Теория (Ancilotto'97; Gao'2010) это подтверждает.



метан

углеводороды

алмаз



[Gao, ARO et al., J. Chem. Phys. 133, 144508 (2010)]

~~Periodic Table of Elements~~

* Lanthanide Series
+ Actinide Series

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Под давлением натрий меняет свою сущность – «алхимическое превращение»

Na

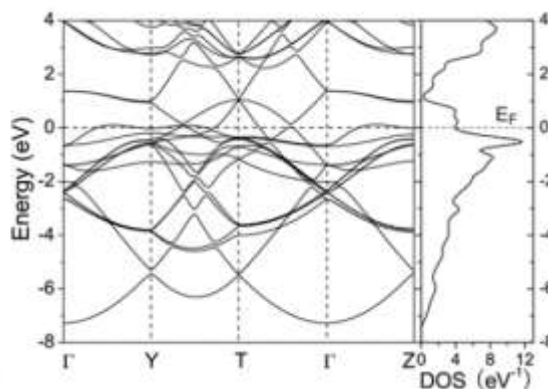
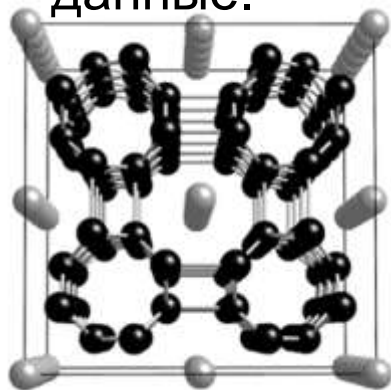


H. Davy

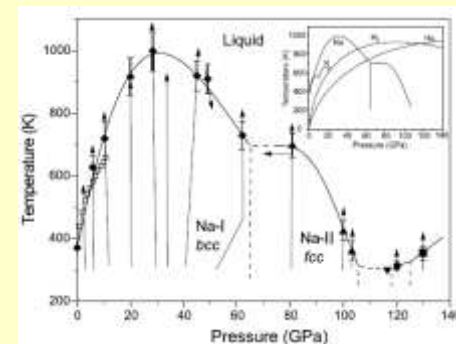
1807: Натрий открыт Гэмфри Дэви.

2002: Hanfland, Syassen, et al. – первое указание на крайне сложную химию натрия под давлением свыше 1 Мбар.

Грегорьянц (2008) – более детальные данные.

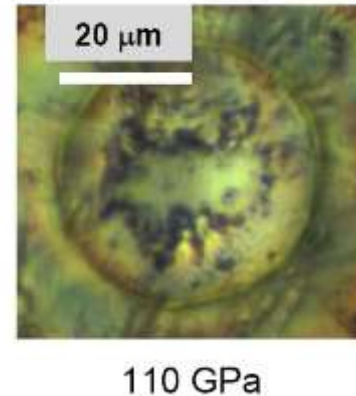
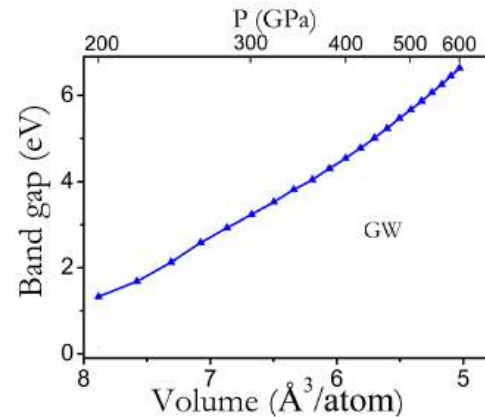
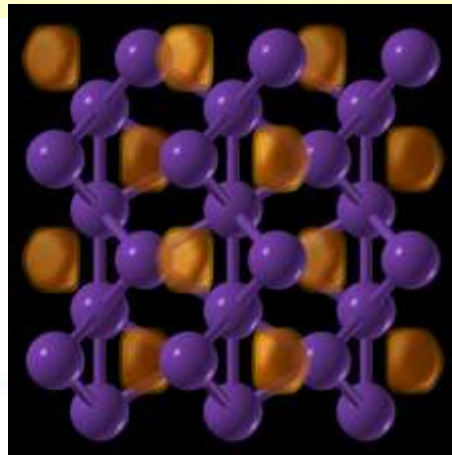
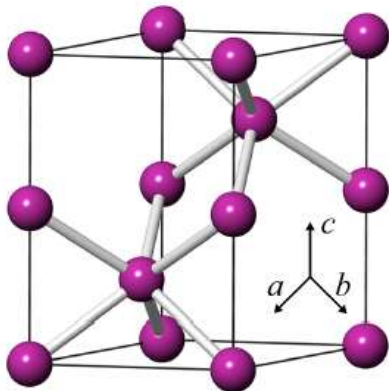


Под давлением натрий становится частично d-металлом!



Мы предсказали новую структуру, которая является прозрачным неметаллом!

Натрий становится прозрачным
при давлении ~2 Мбар
(Ma, Eremets, ARO et al., *Nature* 2009)

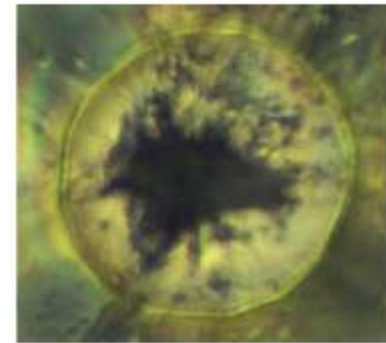
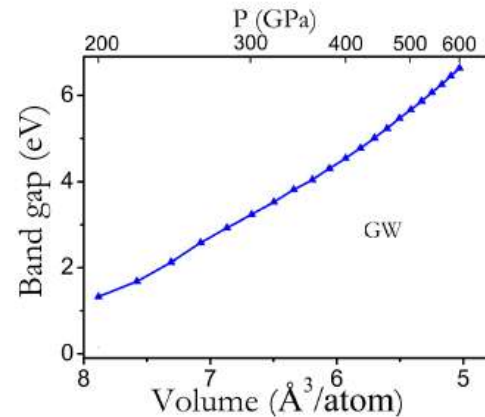
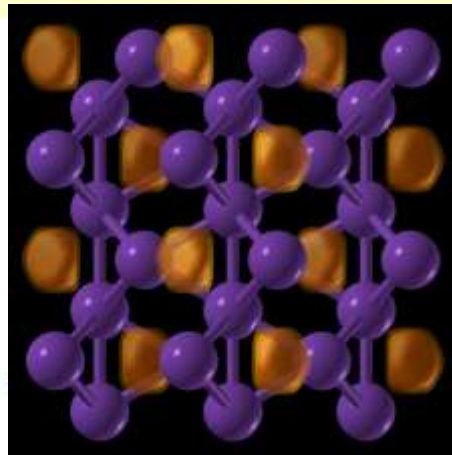
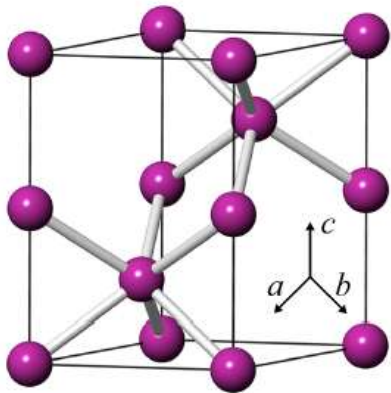


Электроны локализованы в «пустом месте» структуры,
это и делает сжатый натрий неметаллом



Мы предсказали новую структуру, которая является прозрачным неметаллом!

Натрий становится прозрачным
при давлении ~2 Мбар
(Ma, Eremets, ARO et al., *Nature* 2009)



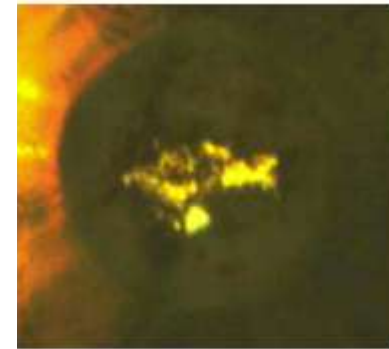
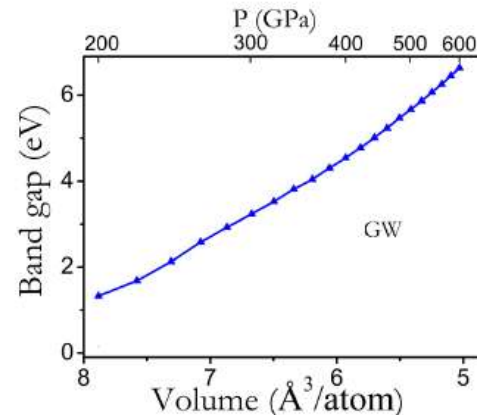
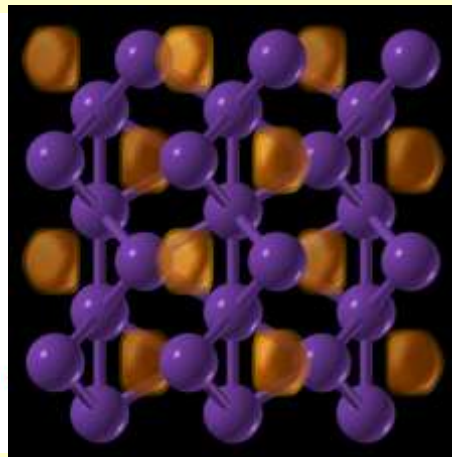
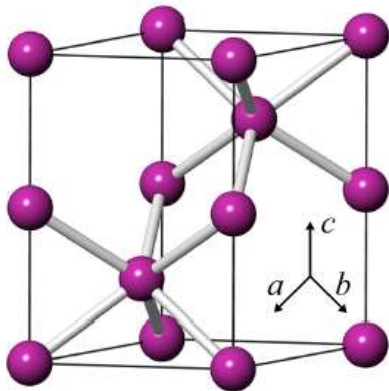
156 GPa

Электроны локализованы в «пустом месте» структуры,
это и делает сжатый натрий неметаллом



Мы предсказали новую структуру, которая является прозрачным неметаллом!

Натрий становится прозрачным
при давлении ~2 Мбар
(Ma, Eremets, ARO et al., *Nature* 2009)



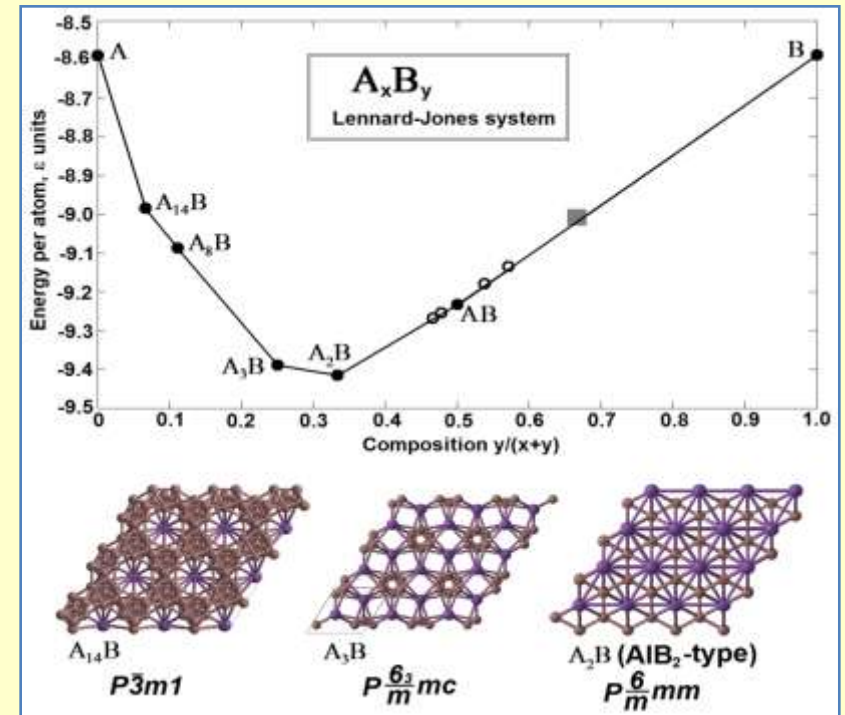
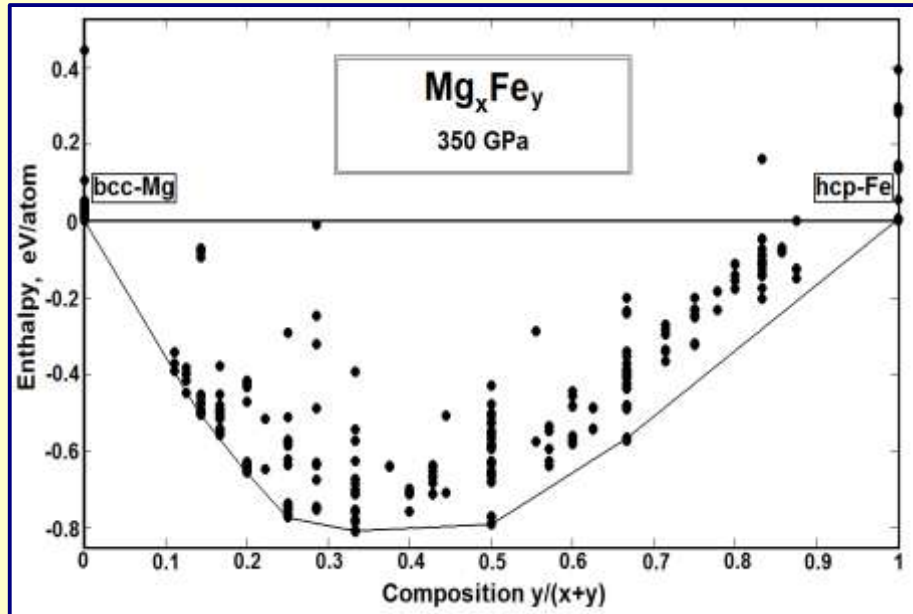
199 GPa

Электроны локализованы в «пустом месте» структуры,
это и делает сжатый натрий неметаллом.

Такие вещества называют «электридами»
(по аналогии с хлоридами, фторидами, и т.д.)



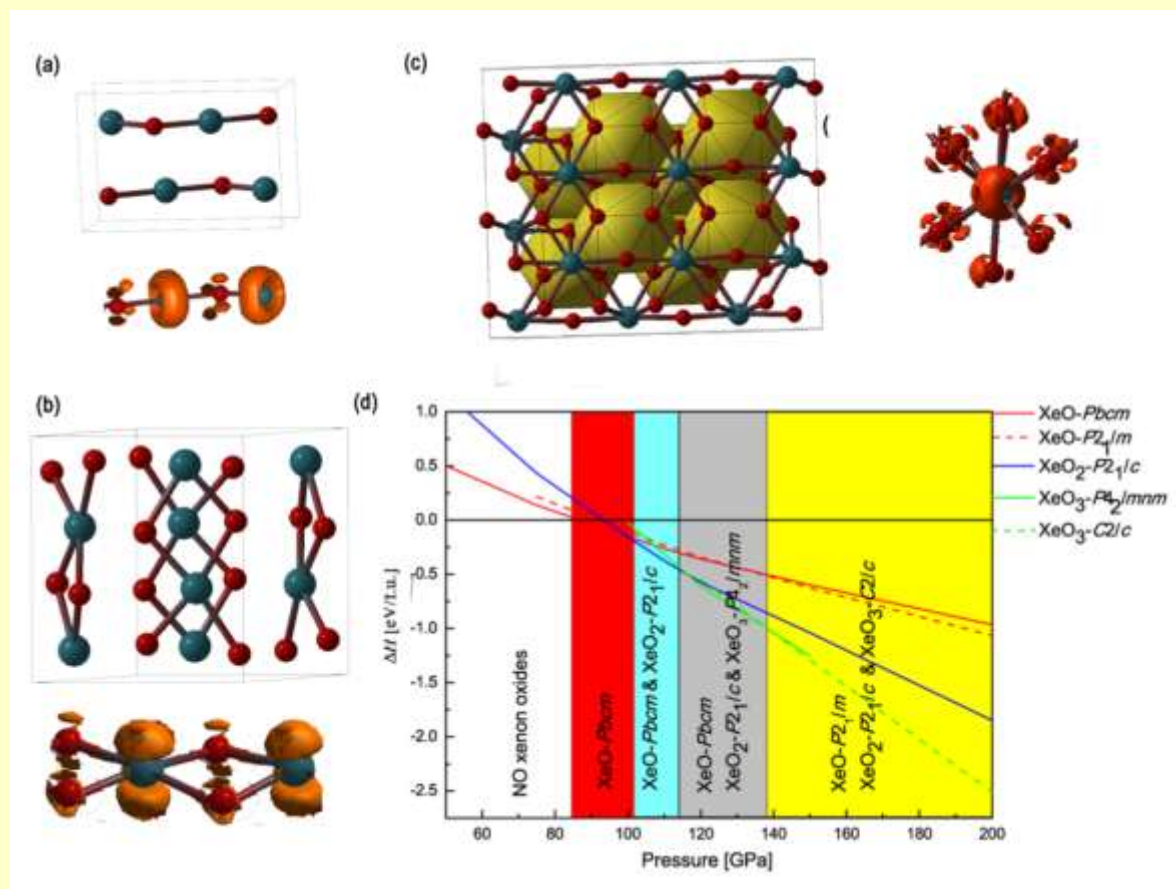
Можно предсказать не только структуру, но и состав



Новые соединения возникают в системе
Fe-Mg при 350 ГПа (ARO et al., 2010)

Новая химия: природа стабильных оксидов ксенона под давлением

- Оксиды Xe становятся стабильными при давлениях >80 ГПа. Неожиданно высокая степень ионности ($\sim 50\%$) связей Xe-O.
- Нетривиальная химия, например, $\text{XeO-Pbcm} = [\text{Xe}^0][\text{Xe}^{4+}\text{O}_2]$

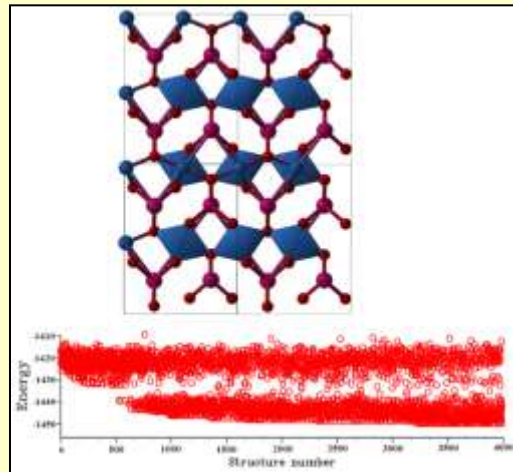


Устойчивые соединения XeO_n (Zhu, Jung, & Oganov, *Nature Chemistry*, в печати)

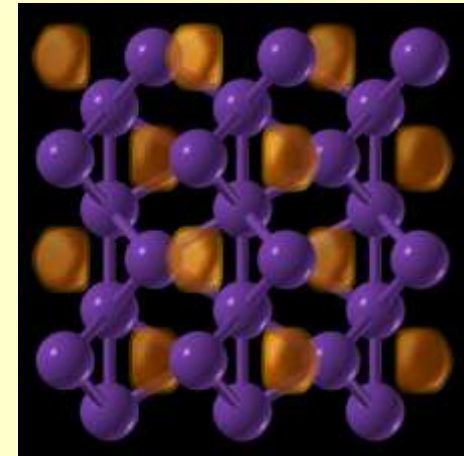
Структура вещества – ключ к познанию мира



1. Структура определяет свойства



2. Предсказывать кристаллические структуры уже возможно



3. Компьютер учится предсказывать новые материалы

Благодарности:

Мои студенты, аспиранты и постдоки:



A. Lyakhov



Y. Ma



S.E. Boulfelfel



C.W. Glass



Q. Zhu



Y. Xie

Коллеги из других лабораторий:

- F. Zhang (Perth, Australia)
- C. Gatti (U. Milano, Italy)
- G. Gao (Jilin University, China)
- A. Bergara (U. Basque Country, Spain)
- I. Errea (U. Basque Country, Spain)
- M. Martinez-Canales (UCL, U.K.)
- C. Hu (Guilin, China)
- M. Salvado & P. Perterra (Oviedo, Spain)
- В.Л. Соложенко (Париж)
- Д.Ю. Пущаровский, В.В. Бражкин (Москва)
- Пользователи программы USPEX (>1100 человек) -
<http://han.ess.sunysb.edu/~USPEX>