



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

Новые методы компьютерного дизайна материалов

Иван Круглов

зав. лаб. машинного обучения ВНИИА

зав. лаб. компьютерного дизайна материалов МФТИ

Email: ivan.kruglov@phystech.edu

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ

Homo.
Science

РОСАТОМ



Homo
Science
ROSATOM

План доклада

Дизайн материалов

- Новые материалы:
 1. Сверхпроводники
- Новые методы дизайна материалов:
 1. Т-USPEX
 2. Двумерные материалы



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



Homo
Science
ROSATOM

План доклада

Дизайн материалов

- Новые материалы:
 1. Сверхпроводники
- Новые методы дизайна материалов:
 1. Т-USPEX
 2. Двумерные материалы

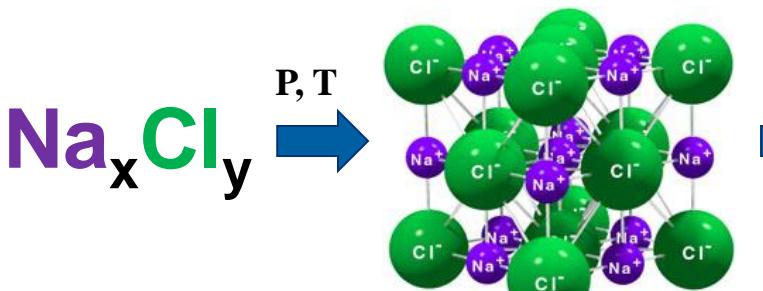


НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

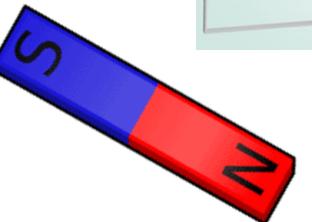
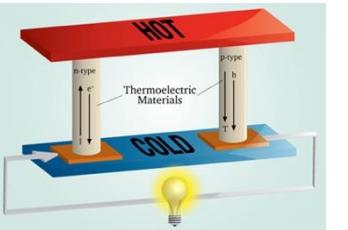
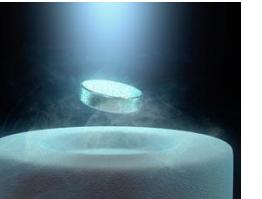


Homo ·
Science
ROSATOM

Дизайн материалов



- Фазовые диагр.
- Терм. свойства
- Мех. свойства
- Другие (ZT, T_c ...)



Методы поиска

Экспериментальные

Теоретические

Случайный поиск, метадинамика, ..
Эволюционный поиск USPEX

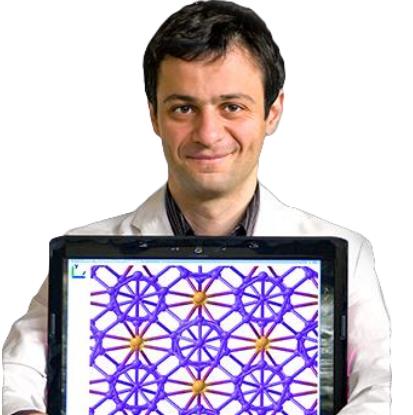
USPEX Computational
Materials
Discovery

b-initio
VASP package
Vienna
Simulation

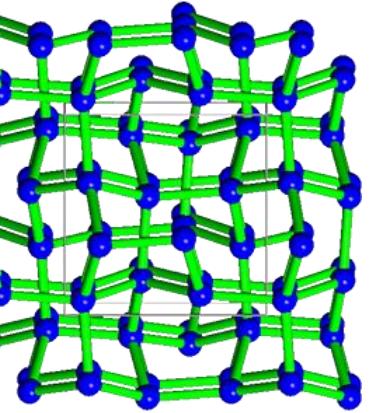


Homo ·
Science
POCATOM

USPEX (Universal Structure Prediction: Evolutionary Xtallography)



USPEX Computational Materials Discovery



Артем Оганов

- Эволюционный алгоритм + квантово-механические расчеты
- ~ 4000 пользователей, > 500 публикаций, 5 патентов
- Предсказание стабильных структур и составов
- Объемные материалы, поверхности, нано- материалы
- Оптимизация физических свойств
- Предсказание путей фазовых переходов

uspx-team.org



Homo
Science
ROSATOM

План доклада

Дизайн материалов

- Новые материалы:
 1. Сверхпроводники
- Новые методы дизайна материалов:
 1. Т-USPEX
 2. Двумерные материалы



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



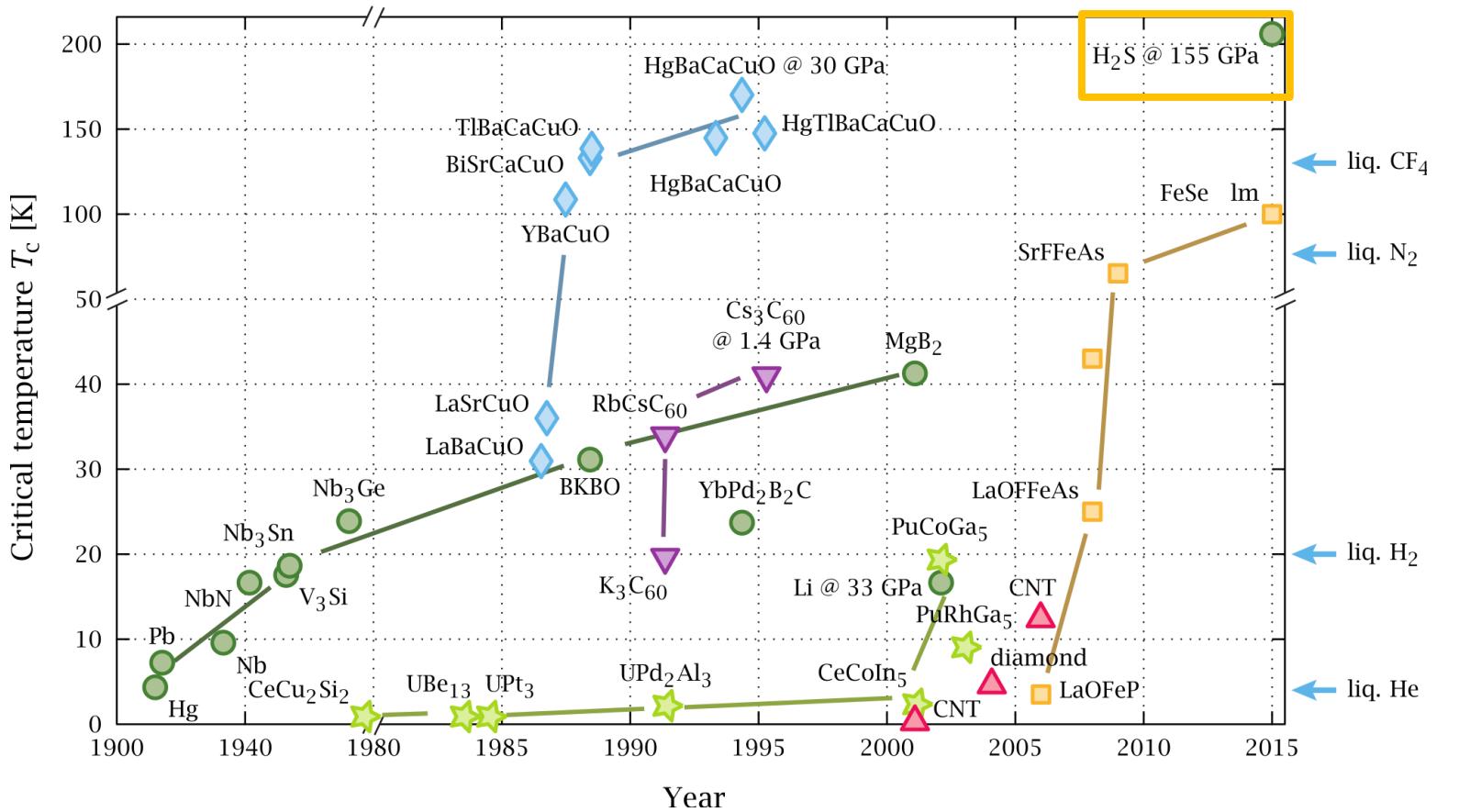
Homo
Science
ROSATOM

Сверхпроводники

S-C-H@260 GPa ● 287 K

La-Y-H@200 GPa ● 256 K

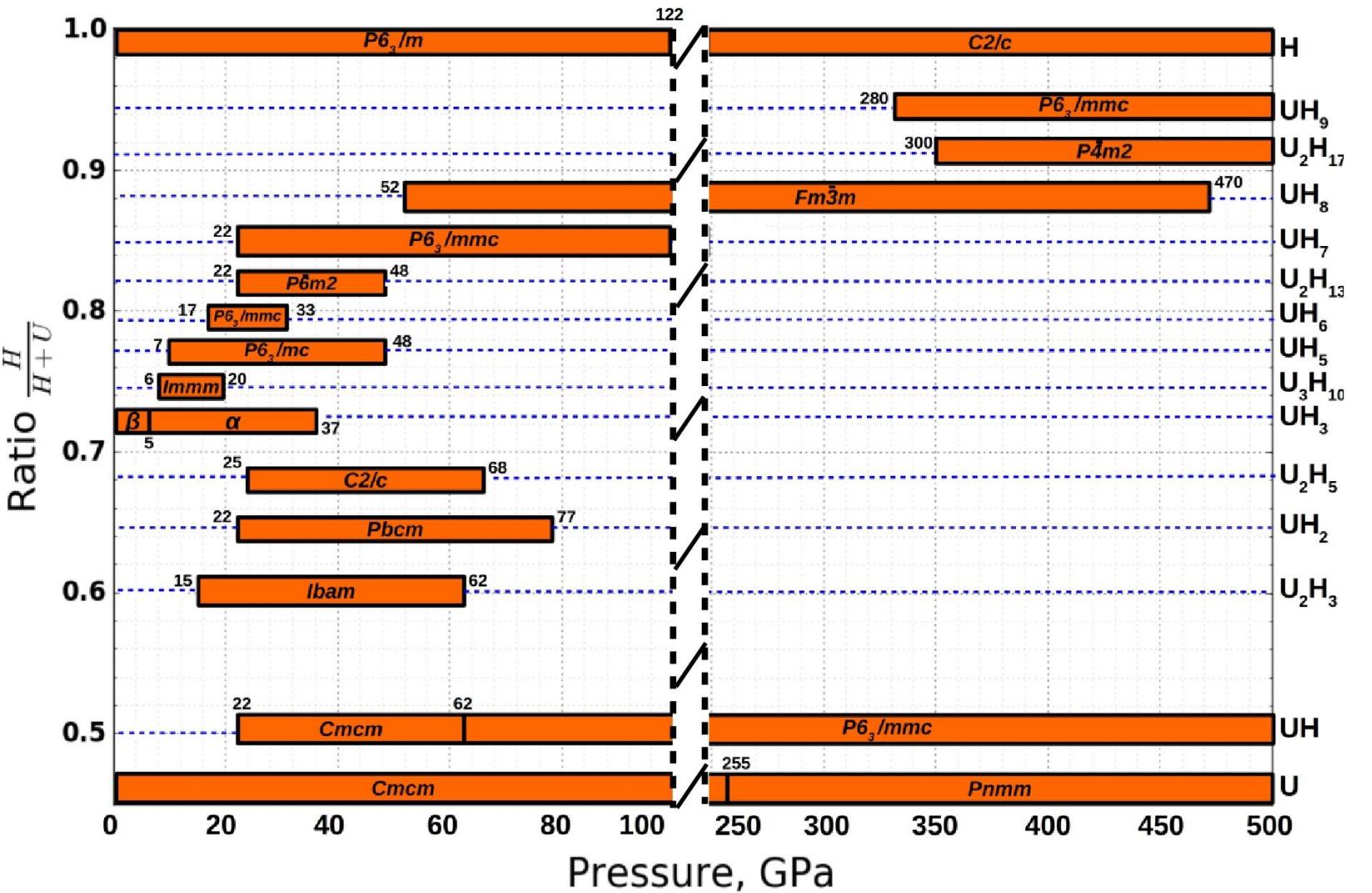
La-H@200 GPa ● 253 K





Homo
Science
ROSATOM

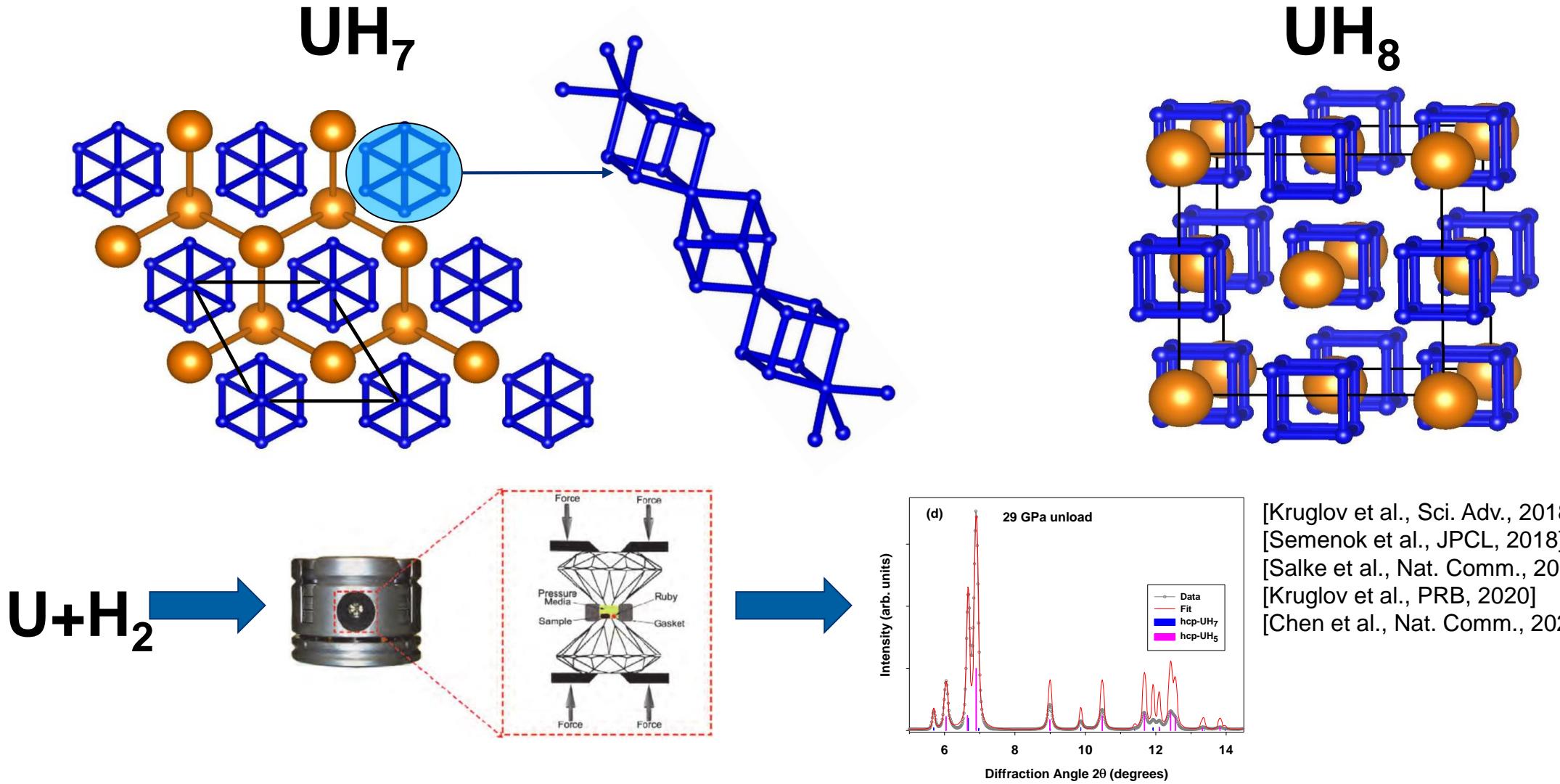
Фазовая диаграмма U-H





Homo
Science
ROSATOM

Фазовая диаграмма U-H





Homo
Science
ROSATOM

План доклада

Дизайн материалов

- Новые материалы:
 1. Сверхпроводники
- Новые методы дизайна материалов:
 1. T-USPEX
 2. Двумерные материалы

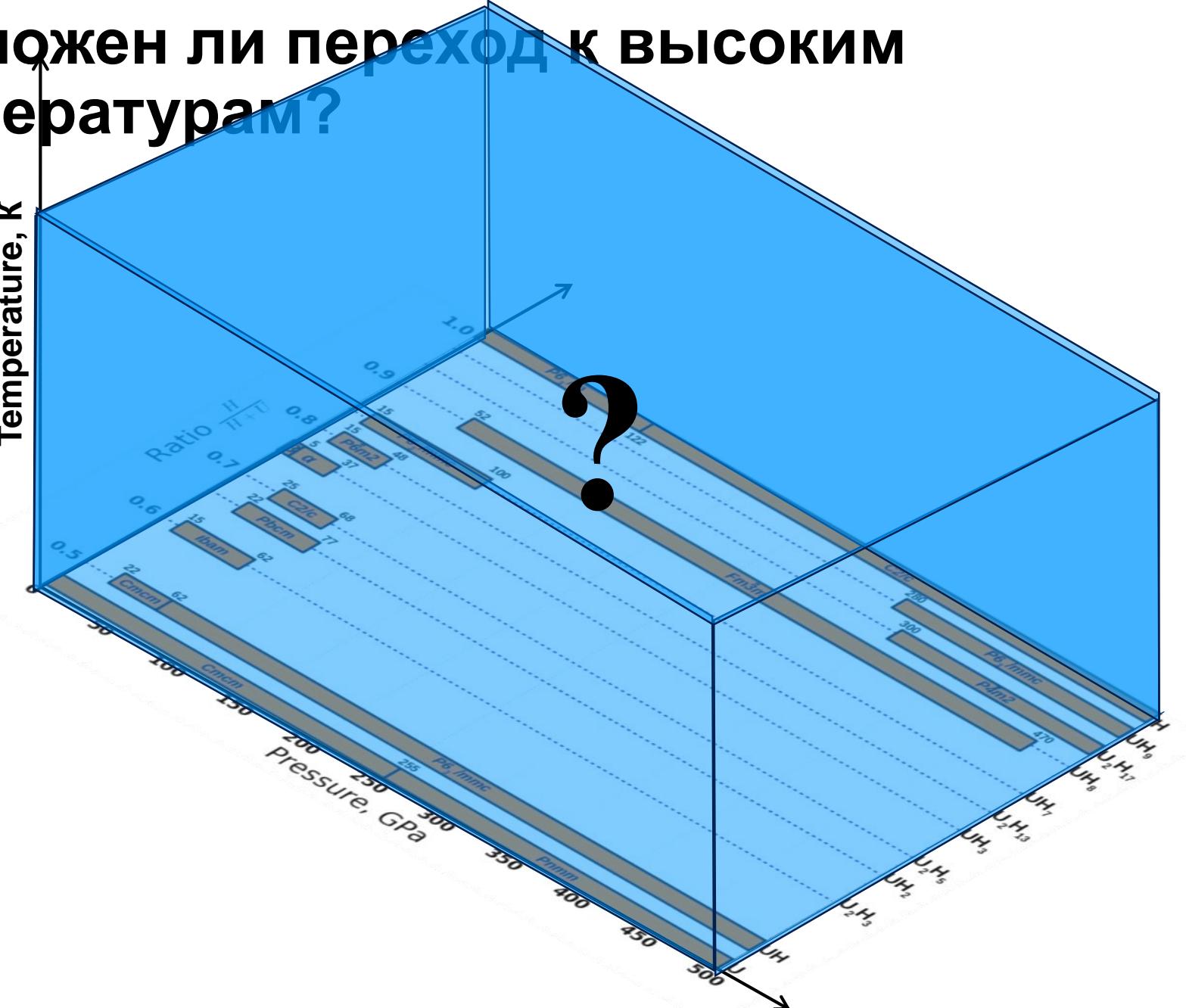


НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



Homo ·
Science
ROSATOM

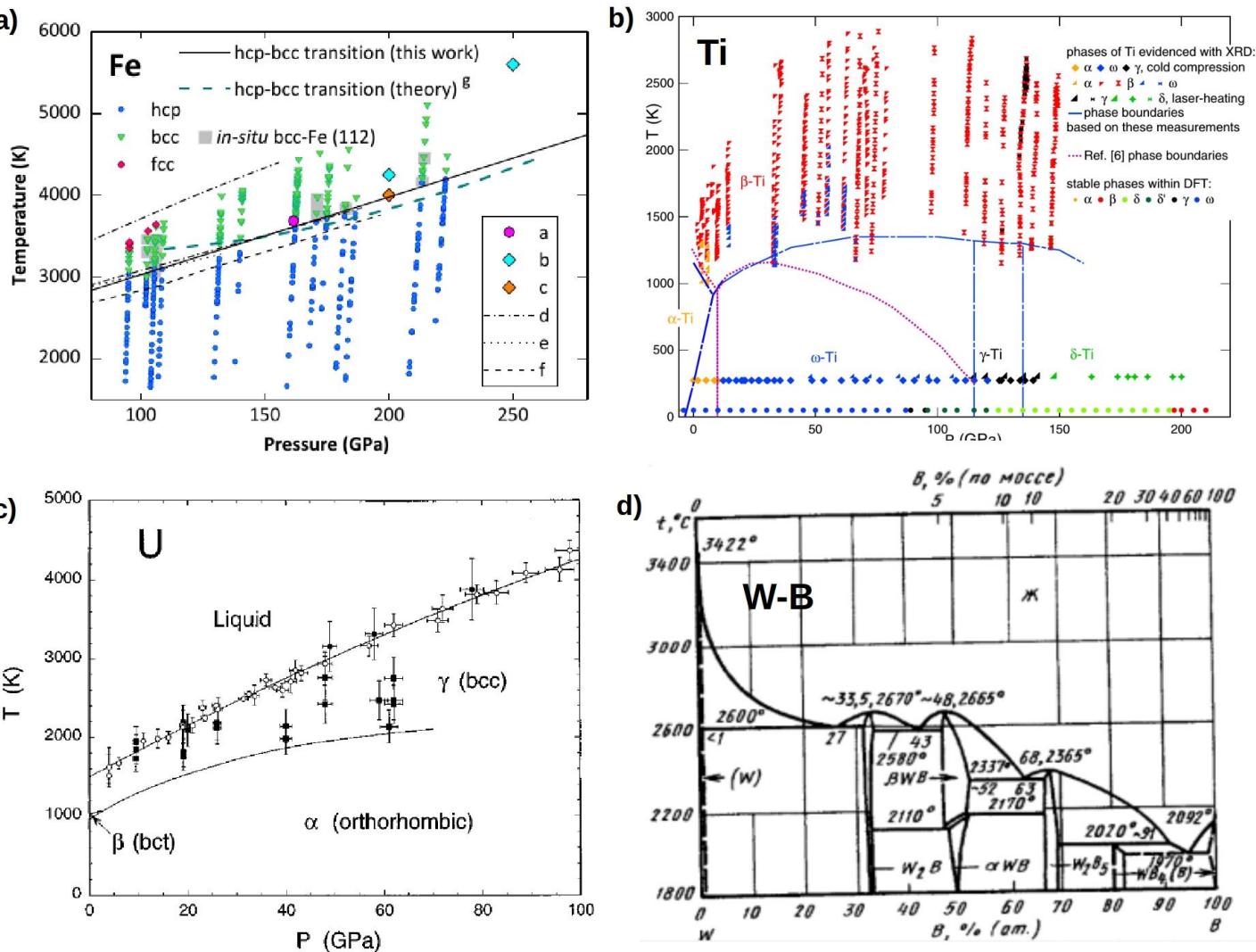
Возможен ли переход к высоким температурам?





Homo ·
Science
ROSATOM

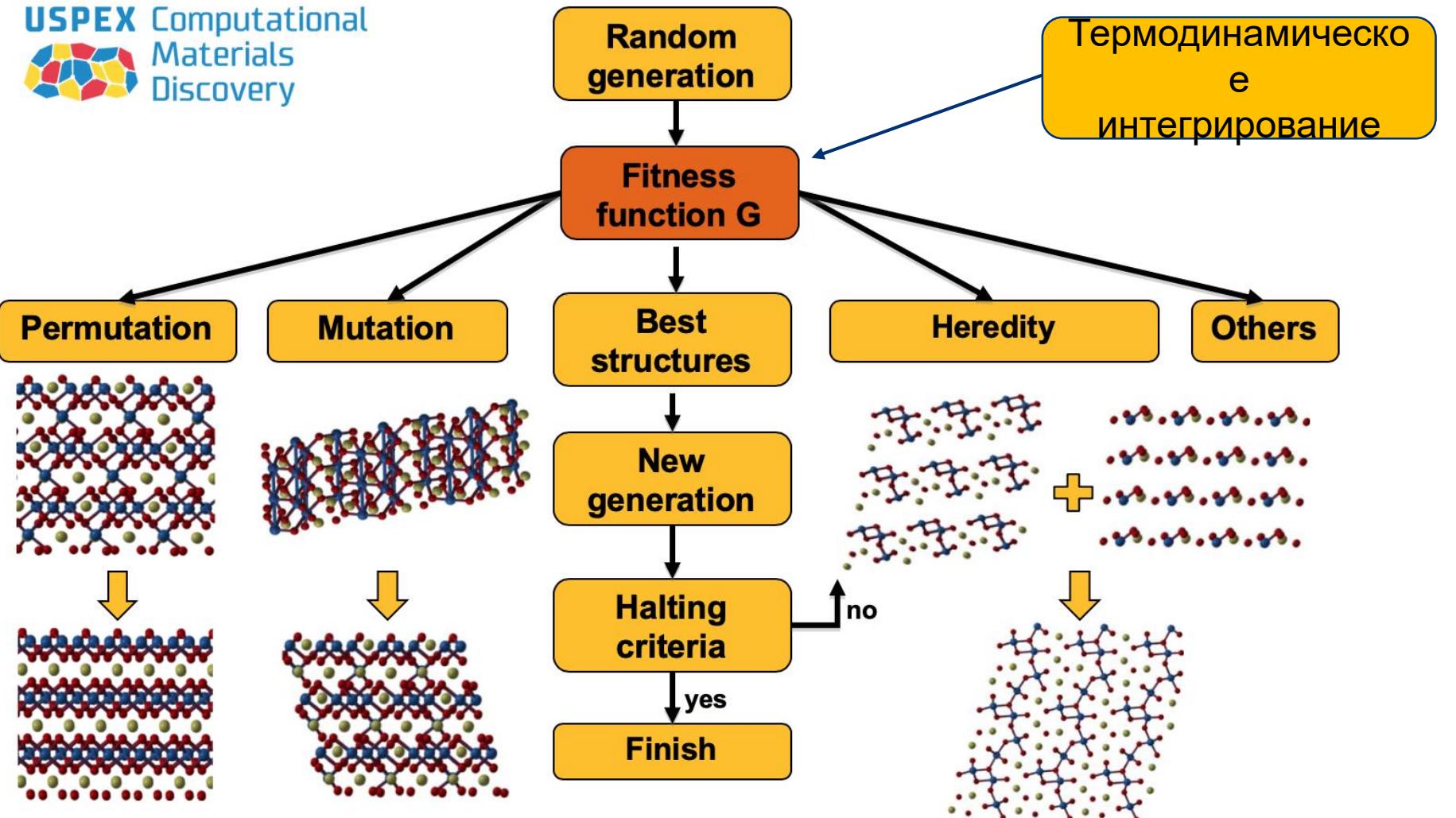
Р-Т фазовые диаграммы





Homo ·
Science
POCATOM

Схема T-USPEX





Homo ·
Science
POCATOM

Cxema T-USPEX

Crystal Structure



Relaxation at 0 K



MD at finite T



Pressure corrections



MD at finite T with
pressure corrections

Free Energy

Database for FE
corrections



Thermodynamic
Integration



FE with all corrections

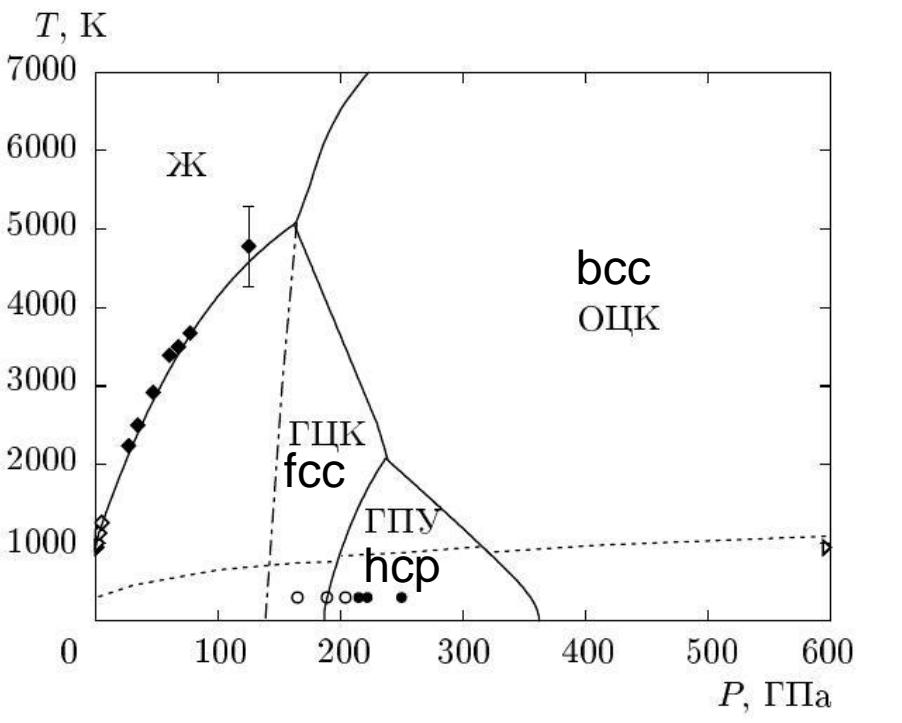


Final structure + its FE

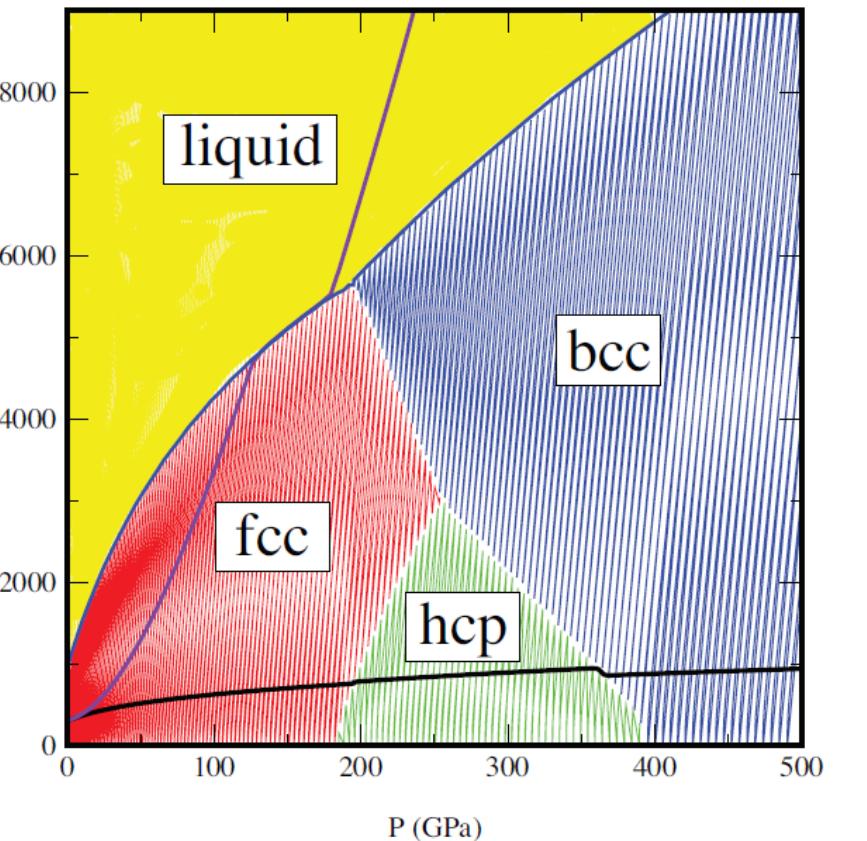


Homo ·
Science
ROSATOM

Алюминий



[Kudakov et al, JETP, 2013]



[Sjostrom et al, 2016, PRB]



Homo
Science
POCATOM

Результаты T-USPEX для Al

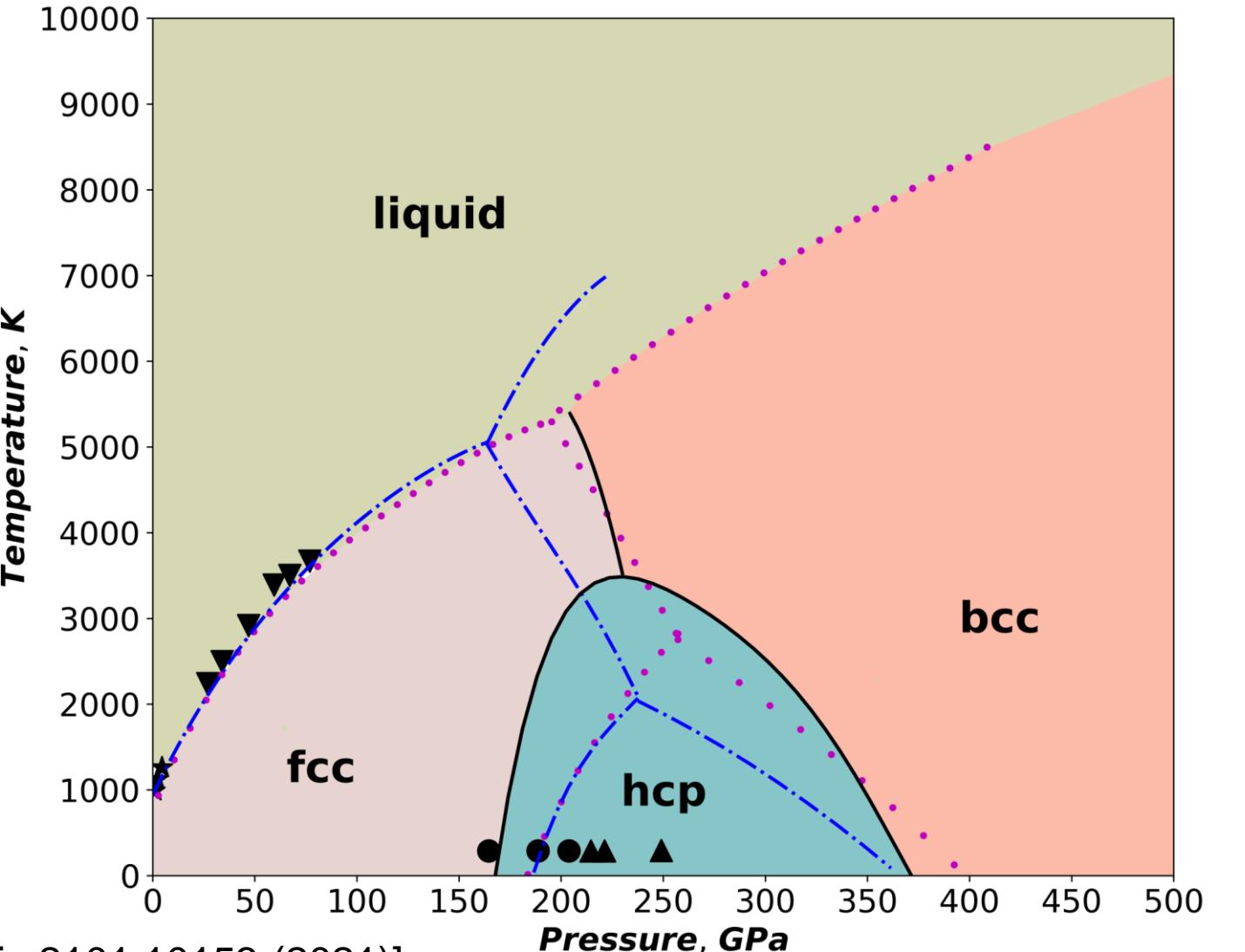
0 GPa 300 K:

SG	N atoms	TI	FE corr 1	FE corr 2	pV	E_Eins	G
225	4	-3.8327	0.0025	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8473
225	4	-3.8159	-0.0144	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8474
225	4	-3.8390	0.0086	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8475
225	4	-3.8090	-0.0211	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8473
225	4	-3.8095	-0.0205	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8472
225	4	-3.8286	-0.0014	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8471
225	4	-3.8237	-0.0066	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8474
225	4	-3.8224	-0.0080	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8476
225	4	-3.8060	-0.0244	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8475
225	4	-3.8279	-0.0025	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8475
225	4	-3.8091	-0.0209	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8472
225	4	-3.8199	-0.0105	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8475
225	4	-3.8101	-0.0203	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8475
225	4	-3.8307	0.0005	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8474
139	14	-3.7393	0.0075	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.7490
225	4	-3.8293	-0.0010	0.0000	0.0000	-0.0171	-3.8475



Homo
Science
ROSATOM

Фазовая диаграмма Al



[Kruglov et al., arXiv:2101.10153 (2021)]



Homo
Science
ROSATOM

План доклада

Дизайн материалов

- Новые материалы:
 1. Сверхпроводники
- Новые методы дизайна материалов:
 1. Т-USPEХ
 2. Двумерные материалы



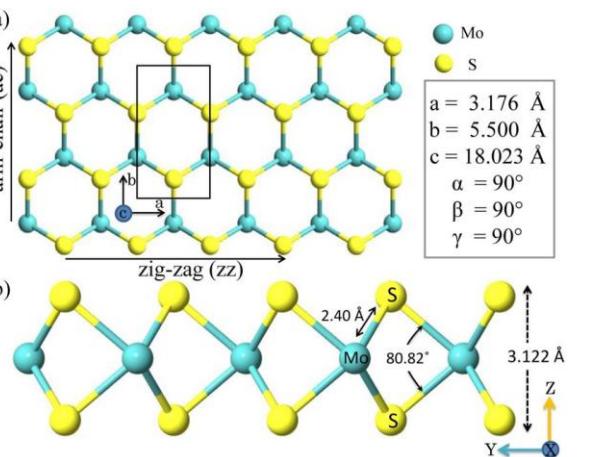
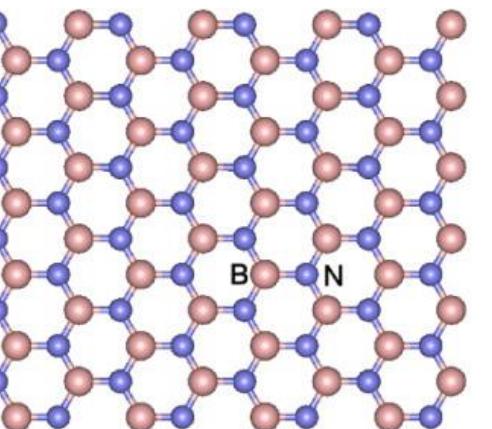
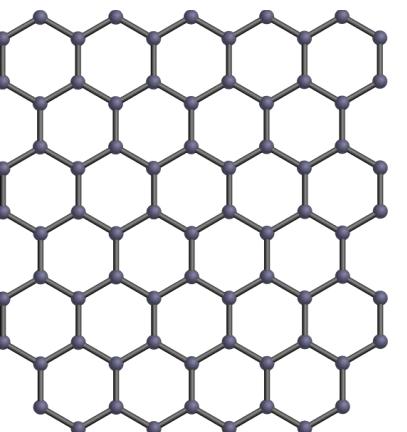
НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



Homo ·
Science
ROSATOM

Двумерные материалы

Двумерные кристаллы – кристаллы, обладающие трансляционной симметрией только в двух направлениях



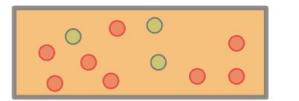
Примеры двумерных материалов: графен (слева), гексагональный нитрид бора (в центре), дисульфид молибдена (справа).



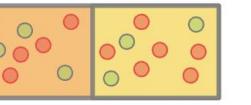
Homo
Science
ROSATOM

USPEX для поиска 2D материалов на подложке

Ранее созданная структура

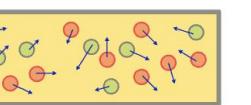


Наследственность

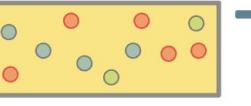


Применение вариационных операторов

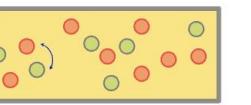
Мутация



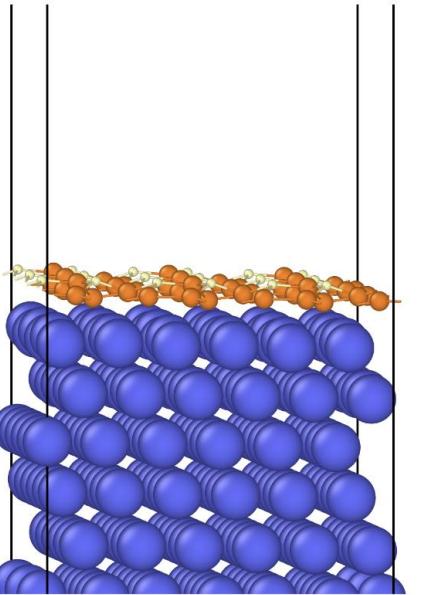
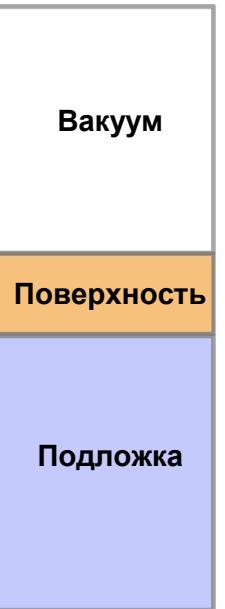
Добавление / удаление атома



Трансмутация



Случайная генерация

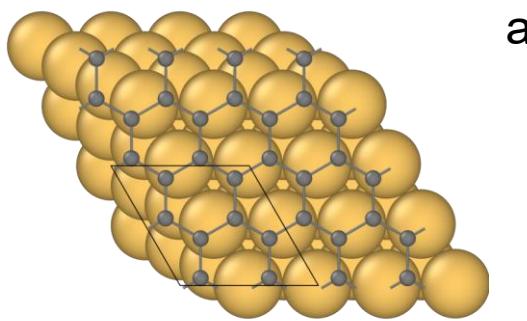


Создание нового поколения с помощью вариационных операторов.
В качестве родительских используются лучшие структуры с предыдущего поколения.

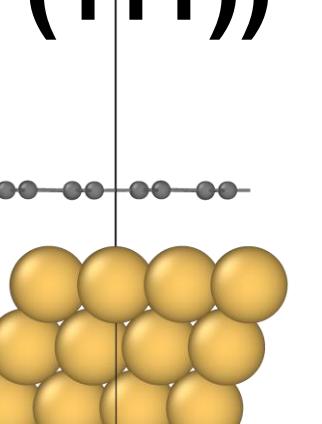


Homo
Science
ROSATOM

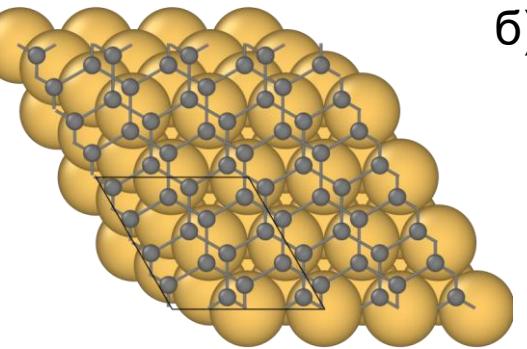
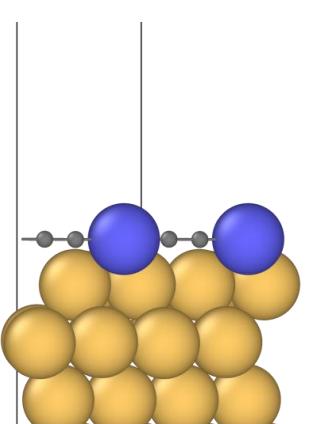
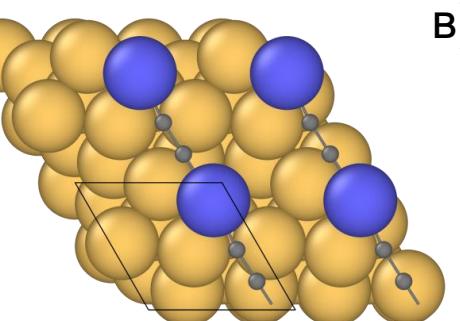
Графен (C / Cu (111))



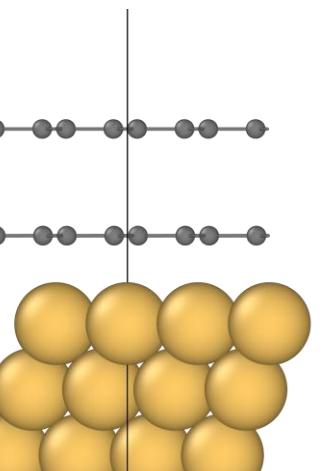
а)



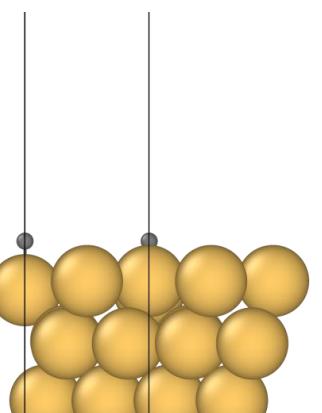
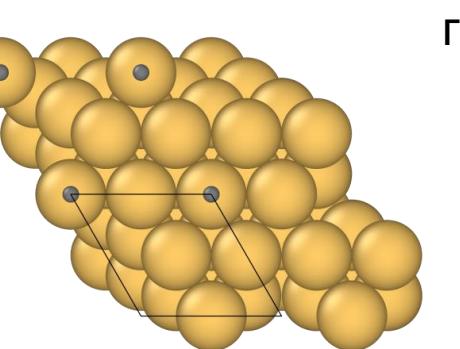
в)



б)



г)

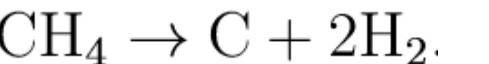


Лучшие структуры углерода на (111) поверхности меди из расчета
эволюционным алгоритмом: монослой графена (а), бислой графена (б),
цепочки CuC2 (в), адсорбированные атомы углерода (г).

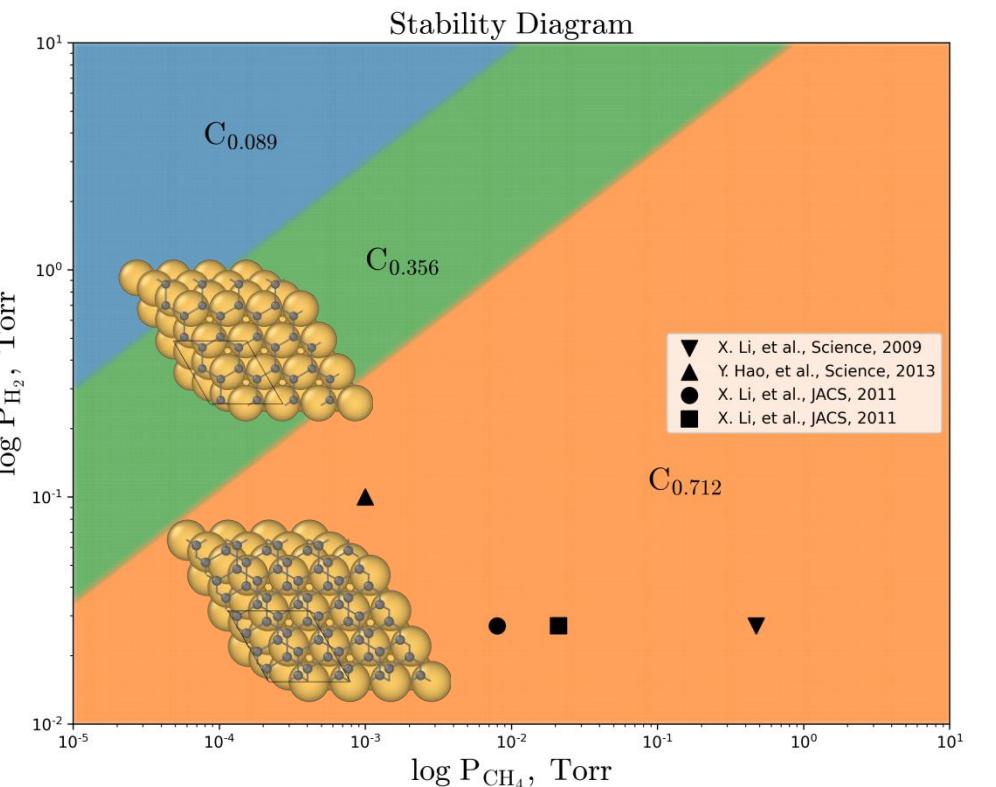
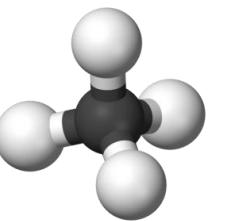


Homo
Science
ROSATOM

Фазовая диаграмма роста графена



$$\mu_{\text{C}}(T, p_{\text{CH}_4}, p_{\text{H}_2}) = \mu_{\text{CH}_4}(T, p_{\text{CH}_4}) - 2\mu_{\text{H}_2}(T, p_{\text{H}_2})$$



Фазовая диаграмма для структур из расчета С / Cu(111) при моделировании CVD роста при T = 1000 °C.

[Mazitov et al, arXiv:2103.07677 (2021)]

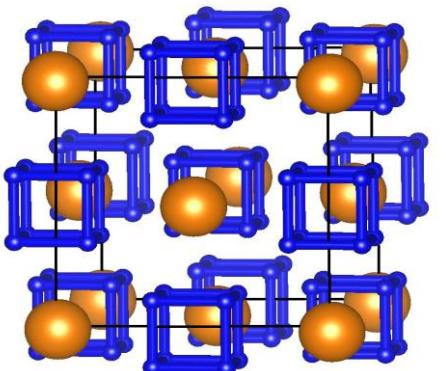


Homo ·
Science
ROSATOM

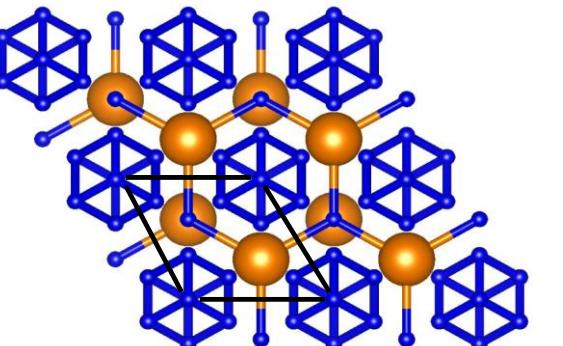
Выводы

Современные методы
компьютерного материаловедения

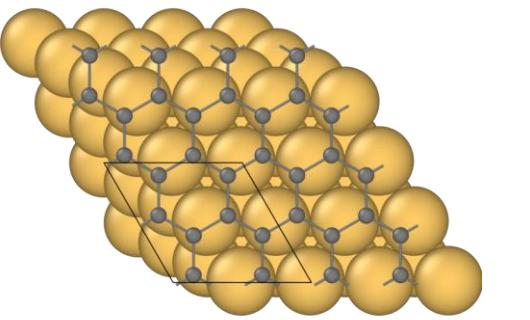
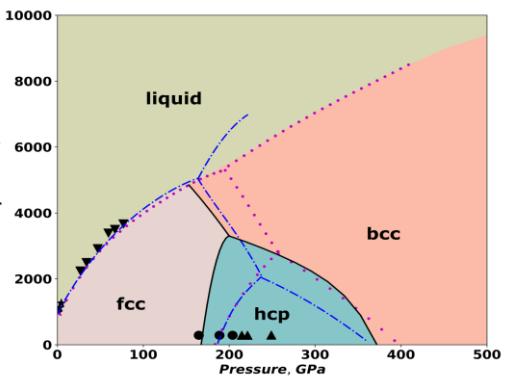
USPEX Computational Materials Discovery



b-initio
VASP Vienna package simulation



Разработка новых методов дизайна
материалов





НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

Спасибо

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ

**Homo.
Science**
РОСАТОМ