

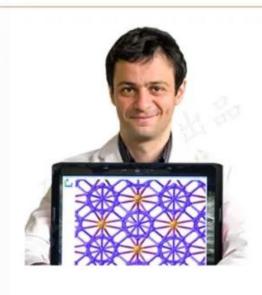
理论计算名师

科研百晓生



基本介绍





Artem R. Oganov

2015-至今: 教授, 俄罗斯斯科尔科沃科技学院

2013-至今:实验室主任、教授,莫斯科物理技术学院

2008-2017: 副教授(2008-2010)、教授(2010-2017)

美国纽约州立大学石溪分校

邮箱: a.oganov@skoltech.ru

课题组网址: https://uspex-team.org/en/lab

Artem R. Oganov教授2002年博士毕业于英国伦敦大学学院,2003-2007年执教于瑞士苏黎世联邦理工学院,2008-2017年起执教于美国纽约州立大学石溪分校。他最主要的成就是发展了遗传进化结构搜索算法,开发了USPEX软件,该软件成为当前世界上应用最为广泛的结合第一原理计算探索材料未知结构的成功工具之一,极大的促进了相关学科的发展。

荣誉和成就



- ▶ 2019 中国政府友谊奖
- ▶ 2017 欧洲科学院院士
- ▶ 2017 俄罗斯物理学高被引学者(Clarivate Analytics)
- ▶ 2016 俄罗斯化学高被引学者(Clarivate Analytics)
- > 2015 俄罗斯科学院教授
- ▶ 2007 欧洲矿物学联合会优秀研究奖

这今为止, Artem R. Oganov教授在Nature (5篇)、Science (2篇)、Nature Materials、Nature Chemistry、PRL和PNAS等著名学术期刊发表了250篇学术论文,并作为编辑出版了2本学术专著,总被他引为 13,471(Web Of Science)和18,297 (Google Scholar). Hindex 高达56 (Web Of Science)和65 (Google Scholar)。在他课题组做过博士和博士后的学生,已有19人获得教授职位,其中16人为中国人。Oganov教授及其团队开发的晶体结构预测软件USPEX不仅能够通过成分预测出晶体结构,而且还能预测纳米团簇、聚合物、界面和二维晶体等,已被全球超过6000位研究者使用。

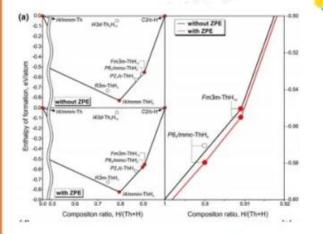
主要研究方向

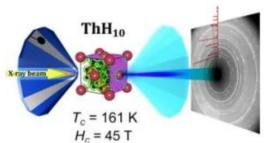


晶体结构预测算法: USPEX

USPEX Computational Materials

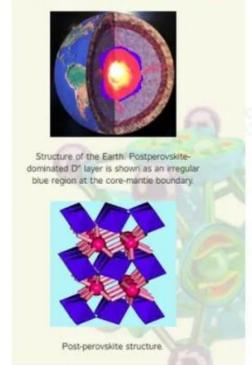
Discovery





Materials Today (in press)

计算材料发现:超导性



Nature 430, 445-448.

地球和行星形成材料



Chem. Sci., 2017,8, 4926-4940

有机晶体结构预测

晶体结构预测算法

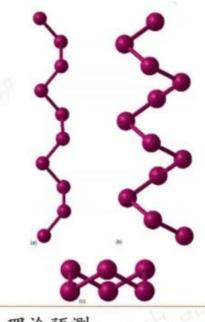


- 1. J. Chem. Phys., 2006, doi: 10.1063/1.2210932
- 2. Comp. Phys. Comm., 2006, doi:10.1016/j.cpc.2006.07.020
- 3. Rev. Mineral. Geochem., 2010, doi: 10.2138/rmg.2010.71.13
- 4. Comp. Phys. Comm., 2010, doi:10.1016/j.cpc.2010.06.007
- 5. Acc. Chem. Res., 2011, doi:10.1021/ar1001318
- 6. Comp. Phys. Comm., 2013, doi:10.1016/j.cpc.2012.12.009
- 7. J. Appl. Phys., 2019, doi:10.1016/j.cpc.2012.12.009

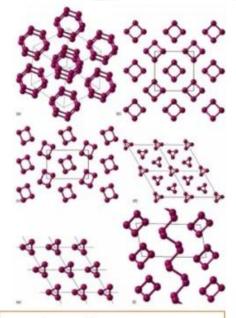
晶体结构预测算法(I)



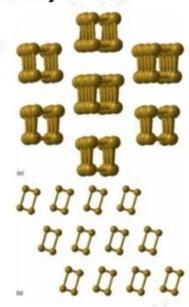
Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques:
Principles and applications (cited: 1524)



理论预测: 高压下硫的结构组成



理论预测: 高压下硫的6种新结构



理论预测:

25 GPa下两种氧的新结构

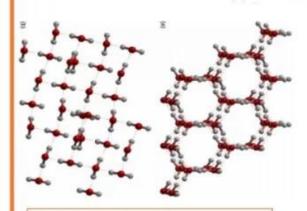
这篇文章介绍一种高效可靠的晶体结构预测方法:结合第一性原理计算总能和一种专门设计的遗传进化算法。这种方法可以在不需要任何实验输入的情

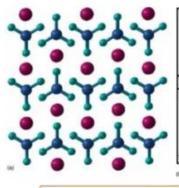
况下预测给定化合物在任何P-T条件下的最稳定晶体结构和一些低能亚稳结构。

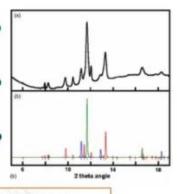
晶体结构预测算法(I)

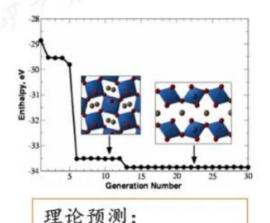


Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications (cited: 1524)









理论预测: 1 atm下两种水分子结构

理论预测和实验验证: 高压下碳酸钙

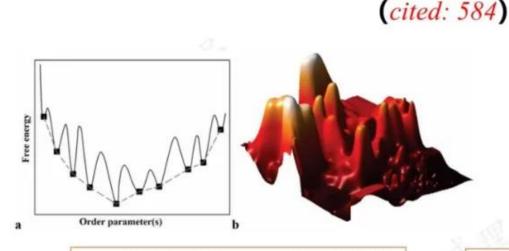
每代最稳结构和焓值

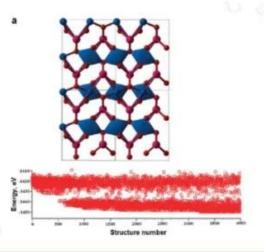
迄今为止,在几十次测试中,成功率极高(接近100%),包括离子结构、共价结构、金属结构和分子结构,单胞中有可达到40个原子。这个方法已经解决了高压晶体学中的一些重要问题,并报道了一些新的高压晶体结构稳定相: ε-氧、硫的新相、碳、硫和氮的新亚稳相、碳酸钙的稳定和亚稳相。同时这篇文章讨论了该晶体结构预测算法成功的物理原因。

晶体结构预测算法 (II)



How Evolutionary Crystal Structure Prediction Works and Why





a.一维势能绘景, b.二维势能绘景

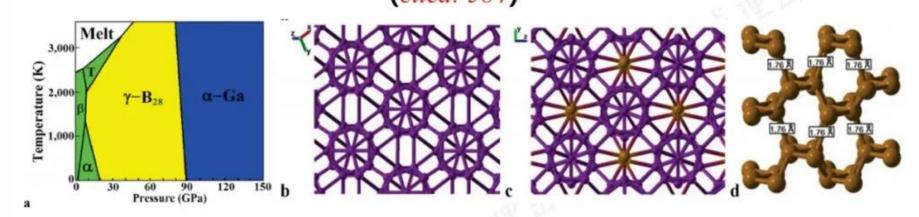
理论预测:包含80个原子稳定的MgSiO3单胞

这篇文章回顾遗传进化算法-USPEX:利用能量绘景理论的最新进展,揭示了USPEX有效的原因,并指出了它的局限性。同时本文论证了能量绘景整体形态的复杂性,探索了其内在维度。由于体系的有序度与能量,和晶体结构的维数多样性之间存在反比关系,随机搜索算法找到基态的机会随着系统规模的增大呈指数增长,而USPEX算法却可以避免这个问题而获得更高的计算效率。

晶体结构预测算法 (II)



How Evolutionary Crystal Structure Prediction Works and Why (cited: 584)



理论预测: 3种不同结构的硼晶体结构和它们稳定存在的压力区间

在高压下,新的、意想不到的现象会发生。USPEX使研究人员能够做出意想不到的发现,如钠的透明相、硼的部分离子形式、钙的复杂超导形式、碳的超硬同素异形体、氮的聚合改性以及新的化合物、过氢化物等。这些方法还发现了新的氢化物超导体,包括"不可能"的LiH_n(n=2,6,8)化合物和CaLi₂。本文讨论了USEPX在分子晶体、可变组分体系和特定物理性质的目标优化方面的扩展。

计算材料发现: 超导性

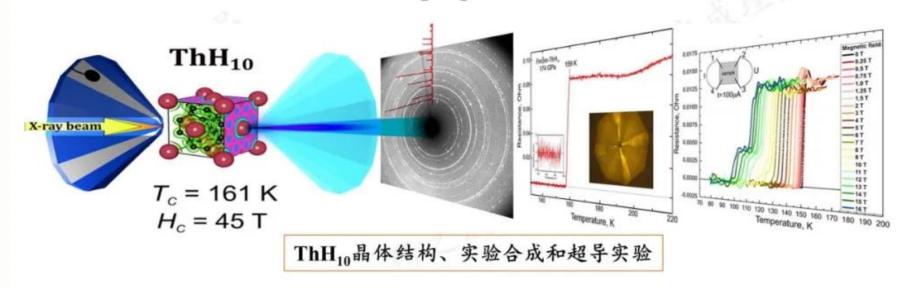


- 1. Mater. Today., 2019, doi: 10.1016/j.mattod.2019.10.005
- 2. Sci. Adv., 2018, doi:10.1126/sciadv.aat9776
- 3. Phys. Rev. B, 2017, doi: 10.1103/physrevb.96.220101
- 4. Phys. Rev. B, 2017, doi:10.1103/physrevb.95.134506
- 5. Sci. Rep., 2016, doi:10.1038/srep22873
- 6. Acta Crystallogr., Sect. C, 2014, doi:10.1107/s2053229613028337
- 7. Proc. Natl. Acad. Sci., 2010, doi: 10.1073/pnas.0908342107

计算材料发现: 超导性 (I)



 Superconductivity at 161 K in thorium hydride ThH₁₀: Synthesis and properties

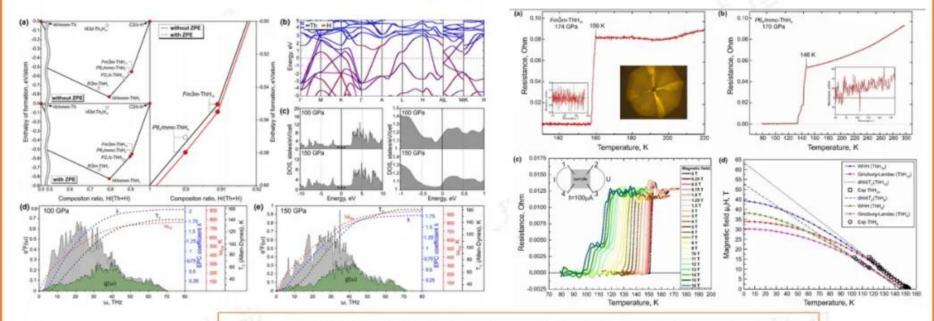


本文报道了两种新型高超导转变临界温度(Tc)的氢化物超导体的定向高压合成: P63/mmc-Th H_9 和Fm-3m-Th H_{10} 。它们的实验临界温度(Tc)分别为146 K和159-161 K,而在压力为170-175 GPa时,上临界磁场(μ Hc)分别为38和45特斯拉。在高达16特斯拉的外加磁场下,超导电性表现为零电阻和Tc的降低。这是在任何化合物以及La H_{10} 、 H_3 S和 $HgBa_2$ Ca $_x$ Cu $_2$ O $_{6+z}$ 等材料中,目前实验获得的最高超导临界温度之一。

计算材料发现:超导性(I)



 Superconductivity at 161 K in thorium hydride ThH₁₀: Synthesis and properties



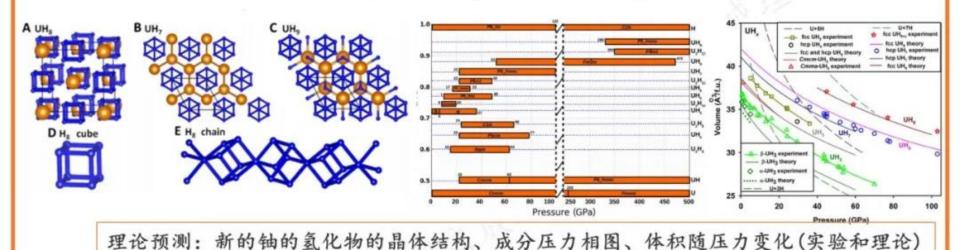
前期理论预测晶体结构和超导、实验观察到预测出结构的超导

本文的实验表明,fcc-Th H_{10} 在85 GPa的压力下是稳定的,可见该材料在所有已知的高 Tc金属富氢化合物当中是独一无二。两个最近预测的Th-H化合物,I4/mmm-Th H_4 (>86 GPa)和Cmc 2_1 -Th H_6 (86-104 GPa)也被合成。并测量了合成的的Th $_n$ H $_m$ 的状态方程,发现与理论计算吻合的很好。

计算材料发现: 超导性 (II)



 Uranium polyhydrides at moderate pressures: Prediction, synthesis, and expected superconductivity



本文使用USPEX寻找压力高达500 GPa的稳定铀的氢化物,发现了14种新化合物,包括富氢的UH $_5$ 、UH $_6$ 、U $_2$ H $_{13}$ 、UH $_7$ 、UH $_8$ 、U $_2$ H $_{17}$ 和UH $_9$,它们的晶体结构以普通面心立方或六方密排铀的亚晶格和特殊的H $_8$ 立方团簇为基础。而在1到103 GPa的高压实验证实了预测的UH $_7$ 、UH $_8$ 和UH $_5$ 这三种结构的存在。许多新预测的相被认为是高温超导体,最高Tc超导体为UH $_7$,预计在高于22 GPa(Tc=44-54 K)的压力下热力学稳定,在压力降到 0

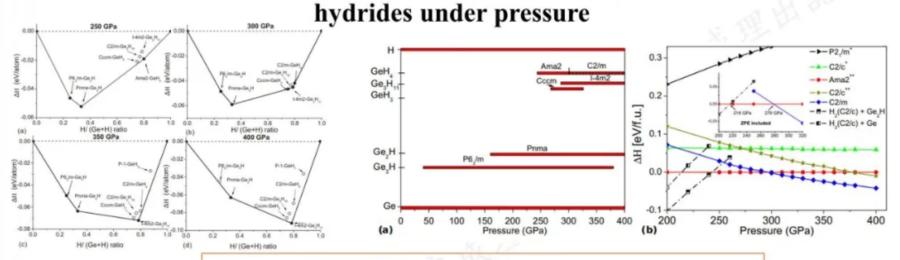
GPa(Tc=57-66 K)时,该相仍然保持动力学稳定。

计算材料发现:超导性(III)



Superconductivity and unexpected chemistry of germanium

bydrides under pressure.



理论预测: 凸包线图、压力成分相图、焓值随压力变化图

本文采用USPEX算法预测稳定的锗氢化物,除了早期Ama2-GeH₄的结构外,还提出了一种C2/m-GeH₄结构(278 GPa能量更低)。作者计算表明C2/m-GeH₄(Tc=67K、280 GPa)是超导体,并发现GeH₄在高于300 GPa时分解为H₂和化合物Ge₃H₁₁。空间基为I-4m2的Ge₃H₁₁在285 GPa以上时Tc=43K。作者经过分析,锗氢化物的由压力引起的相稳定与类似的等电子体系(Si氢化物和Sn氢化物)是不同的,并且它们的超导性主要源于氢化物电子-声子耦合中的氢的摇摆、弯曲和拉伸。

地球和行星形成材料

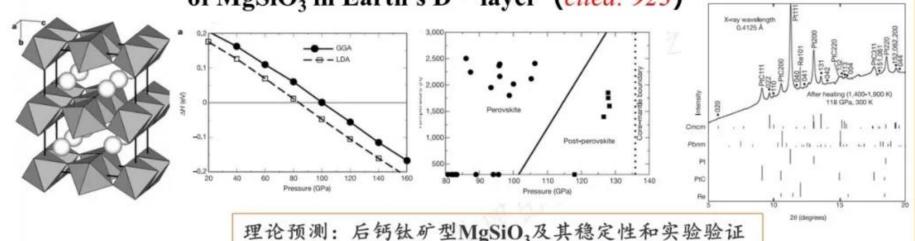


- 1. Phys. Rev. B., 2017, doi: 10.1103/physrevb.96.104101
- 2. Sci. Rep., 2016, doi:10.1038/srep32486
- 3. Sci. Rep., 2015, doi: 10.1038/srep18347
- 4. Earth Planet. Sci. Lett., 2010, doi:10.1016/j.epsl.2010.04.026
- 5. Earth Planet. Sci. Lett., 2005, doi:10.1016/j.epsl.2005.10.014
- 6. Nature., 2004, doi:10.1038/nature02701
- 7. Nature., 2005, doi:10.1038/nature04439
- 8. Proc. Natl. Acad. Sci., 2005, doi:10.1073/pnas.0501800102

地球和行星形成材料 (I)



• Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO₃ in Earth's D '' layer (cited: 923)

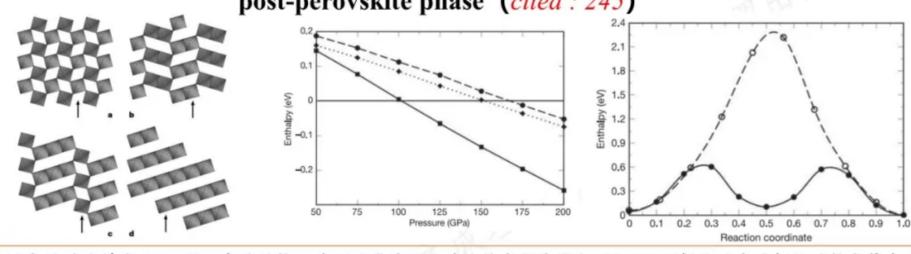


地球下地幔一般认为主要由(Mg,Fe)SiO₃钙钛矿、少量的(Mg,Fe)O和CaSiO₃组成。但一直以来无法解释地幔最下面150公里(D"层)的异常性质与此矿物有关。本文通过第一性原理和高压实验,证明在D"层的压力和温度下,MgSiO₃由钙钛矿转变为层状CaIrO₃型后钙钛矿相。后钙钛矿相的弹性性质及其稳定场解释了D"层观测到的几个令人困惑的性质:其地震各向异性、其顶部强烈波动的横波不连续性,以及可能存在的横波速度与纵波速度之间的反相关关系。

地球和行星形成材料 (II)



Anisotropy of Earth's D'' layer and stacking faults in the MgSiO₃
 post-perovskite phase (cited: 245)



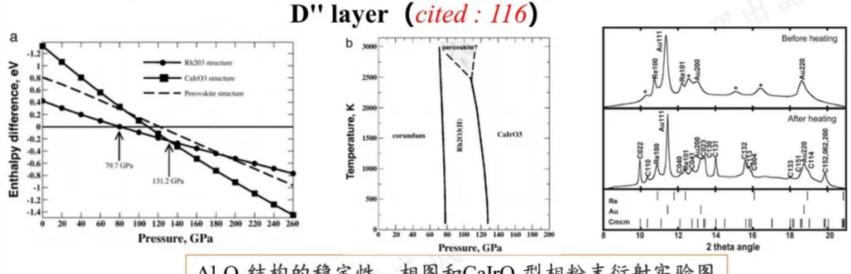
巨分子动力学发现MgSiO3多种结构、其不同晶胞压力随焓值变化曲线和120 GPa下钙钛矿向后钙钛矿转变势垒

本文使用一种新的模拟技术,第一性原理巨分子动力学,来识别介于钙钛矿相和后钙钛矿相之间的一类低能多型层错结构。巨分子动力学计算表明,层错形成时的平面滑动是发生相变的最有利途径,也是钙钛矿和后钙钛矿塑性变形的可能机制。特别是,钙钛矿的预测滑移面为{010}(与实验一致),后钙钛矿的预测滑移面为{110}(与之前预期的{010}滑移面相反)。钙钛矿后期的{110}滑移面需要较小的晶格择优取向,同时解释地球物理观测到的D"层剪切波各向异性。

地球和行星形成材料 (III)



The high-pressure phase of alumina and implications for Earth's



Al₂O₃结构的稳定性、相图和CaIrO₃型相粉末衍射实验图

本文通过第一性原理和高压实验,发现了氧化铝(Al_2O_3)在130GPa以上采用 $CaIrO_3$ 型结构。这一发现实质上改变了氧化铝高压行为的研究;特别是钙钛矿型的 Al_2O_3 在0 K是不稳定的,而 $CaIrO_3$ 型相是对以往冲击波实验的重新解释。如果实验中的电导率增加的是由于 Al_2O_3 的 $CaIrO_3$ 型相的高离子迁移率引起的,则在 $MgSiO_3$ 等后钛矿相结构(地球D"层中的主要矿物相)中也会出现类似的效果。同时本文讨论了Al的加入对 $MgSiO_3$ 由钙钛矿型向后钙钛矿型结构转变的影响。

有机晶体结构预测

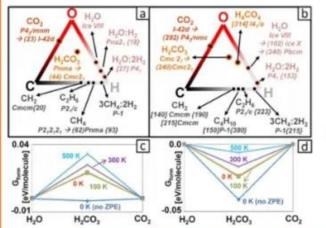


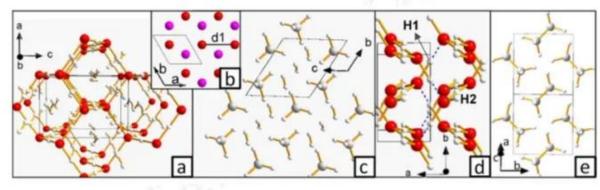
- 1. Faraday Discuss., 2018, doi: 10.1039/c8fd90032a
- 2. Chem. Sci., 2017, doi:10.1039/c7sc00168a
- 3. Sci. Rep., 2016, doi: 10.1038/srep32486
- 4. Nat. Commun., 2014, doi:10.1038/ncomms5845
- 5. Acta Crystallogr., Sect. A., 2014, doi:10.1107/S2053273314092420
- 6. Acta Crystallogr., Sect. B., 2013, doi:10.1107/s2052520616007447
- 7. Proc. Natl. Acad. Sci., 2011, doi:10.1073/pnas.1103145108

有机晶体结构预测(I)



Novel Stable Compounds in the C-H-O Ternary System at High Pressure





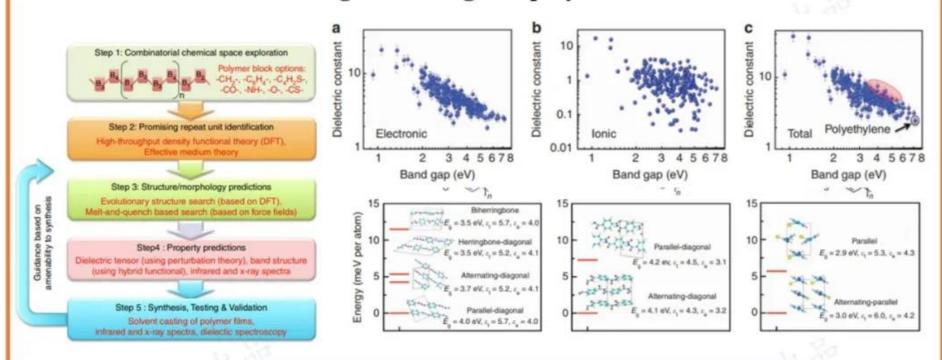
理论预测: C-H-O体系的稳定相和CO,-H,O体系的凸包线图、C-H-O体系新的晶体结构

本文使用最新的可变成分USPEX算法,探索了压力高达400 GPa的C-H-O系统。除了发现已知元素和分子新的稳定多晶型外,还预测了新化合物的形成。 $2CH_4:3H_2$ 包合物在低压下形成,并在215 GPa以下保持稳定。碳酸(H_2CO_3)在普通大气压条件下极不稳定,而在约1 GPa会放热形成;随压力升高聚合,超过314 GPa,与水反应形成正碳酸(H_4CO_4)。同时通过分析电荷密度和电子局部化函数的分布,合理解释了这种非预期的高压化学现象,并讨论了它对一般化学和行星科学的启示。

有机晶体结构预测 (II)



Rational design of all organic polymer dielectrics



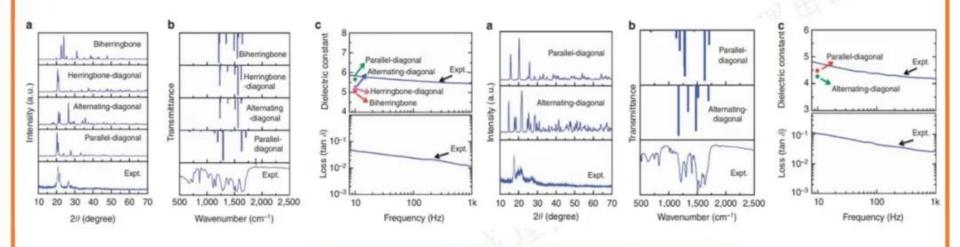
电介质材料筛选策略模型、根据策略筛选预测出的聚合物

本文提出了一种具有连续下降阶段分层建模策略,以加速识别在给定应用中有可能超过 "标准"材料的电介质聚合物。一些最有前途的聚合物的成功合成、所测得的有吸引力 的介电性能(与预测的定量一致)有力地支持了本文所提出的材料选择方法。

有机晶体结构预测 (II)



Rational design of all organic polymer dielectrics



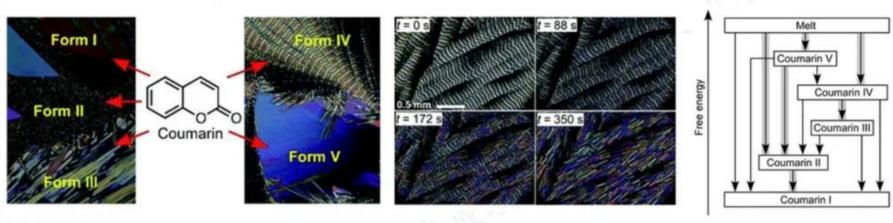
不同重复单元聚合物的预测和实验验证数据

这些筛选出聚合物的一个共同特征是至少出现一个极性单元,-NH-,-CO-和-O-,以及至少一个芳香环,-C₆H₄-和-C₆H₂S-。本文这三种聚合物的实验测量和预测(结构、电子和介电)性能之间的具有良好的一致性,并且其中一种聚合物(即,[-NH-CO-NH-C₆H₄-]n)具有低介电损耗。可以看出本文为这种合理的计算驱动的材料发现方法提供了一定的验证和希望。

有机晶体结构预测 (III)



Powder diffraction and crystal structure prediction identify four new coumarin polymorphs



香豆素的五种晶体结构、第III和第IV晶型之间相转变过程、室温下香豆素晶型之间的关系

香豆素是1820年从豆子中分离出来的一种简单的商品化学物质,这今为止,它只产生了一种固态结构。本文采用计算晶体结构预测算法和X射线粉末衍射相结合的方法,确定了香豆素四种新的亚稳态形式,并求解了它们的晶体结构。可以看出香豆素具有五种晶体结构,已成为少数在环境条件下表现出广泛多态性的刚性分子之一。本文并讨论香豆素体系之间的弱分子间相互作用、结晶机制和动力学效应。