学术报告

题　目： **Computational Materials Discovery**

报告人： **Artem Oganov**

时　间： **2014 年 7 月 8 日(周二)晚上 19:00**

地　点： **中科院固体所 3 号楼 321 会议室**

报告摘要：

The development of powerful structure prediction methods and codes, such as our USPEX code enables prediction of materials with superior or unusual properties. I will discuss several thrusts of our recent work and related fundamental questions:
A. Search for superhard and ultrahard materials. Discovery of new ultrahard phases (e.g. MnB_3) in apparently well-studied systems at normal conditions. Phase diagram of the elusive C-N system. Can a material harder than diamond exist?
B. Low-dimensional systems. New techniques have been developed to deal with surfaces, 2D-crystals, polymers. Recently, we made discovered two new high-permittivity polymers, and predicted a 2D boron crystal, much more stable than previous proposals and having massless Dirac fermions.
C. Search for exotic chemistry, which produces unusual materials.

Recently, we predicted a new hydrogen hydrate H_2O*2H_2 (i.e. H_6O) to be stable at pressures above 38 GPa; having 18 wt.% of easily removable hydrogen, this could be an ideal energy storage material if one can find a way of stabilizing it at normal conditions. More intriguingly, we have discovered a class of “impossible” chemical compounds – such as Na_3Cl, Na_2Cl, Na_3Cl_2, $NaCl_3$, $NaCl_7$ – to become stable under pressure. More recently, we predicted some of such compounds, e.g. KCl_3, to be stable at normal conditions. KCl_3 can find industrial use as a chlorine storage material.

报告人简介：

Artem Oganov 教授 1975 年 3 月生于俄罗斯莫斯科，2002 年博士毕业于英国伦敦大学学院（UCL），2003-2007 年执教于瑞士苏黎世联邦理工学院（ETH），2008 年起执教于美国纽约州立大学石溪分校（Stony Brook University），2010 年晋升正教授，2012 年 8 月入选中组部第八批“千人计划（创新人才短期项目）”，受聘于西北工业大学材料学院。截至 2012 年已发表文章 100 多篇，包括 5 篇 Nature（IF=36.101）、1 篇 Nature Chemistry（IF=20.524） 1 篇 Nature Materials（IF=29.897）、1 篇 Acc. Chem. Res. （IF=21.84）、 5 篇 PNAS（IF=9.771）和 5 篇 PRL（IF=7.621）等世界顶级刊物（某些论文与诺贝尔化学奖得主 Roald Hoffmann 合作发表），总引用 2635 次，Hirsch’s h-index 为 28。主导开发的 USPEX 晶体结构预测软件（Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography：USPEX）能够基于材料的化学成分和给定的温度/压力，预测材料的稳定结构和一系列低能介稳结构，从而奠定了该方法在晶体结构预测领域的重要地位，已拥有 1000 多个全球用户（组），并对学术研究免费开放。现在，该方法已推广到分子晶体、团簇、变成分结构、相变路径和基于力学和功能性质的晶体结构预测。担任 Journal of Superhard Materials 编委、Nature 出版集团《Scientific Reports》编辑顾问、《American Mineralogist》编辑、《Zeitschtrift für Kristallographie》 客座编辑，共同创建了欧洲晶体学会的矿物晶体学分会，并担任副主席。是“新闻周刊”评选的 20 位俄罗斯籍海外科学家之一（Top 20 Newsweek’s Russian scientist abroad）和“福布斯”评选的十位著名俄罗斯籍科学家之一（Top 10 the world’s most renowned scholars of Russian origin）。

欢迎大家踊跃参加！