

НОВЫЕ НЕОБЫЧНЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СОСТОЯНИЯХ

Оганов А.Р.

Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля 3, 121205 Москва, Россия

До середины 2000-х гг. задача предсказания кристаллических структур по химическому составу считалась нерешаемой. Эта ситуация кардинально изменилась, и особую роль в этом сыграл наш эволюционный метод/программа USPEX (usrex-team.org), которую я и мои ученики разрабатывали с 2004 г и которая сейчас имеет более 5000 зарегистрированных пользователей. USPEX рутинно предсказывает кристаллические структуры по химическому составу, и даже способен предсказывать составы стабильных соединений заданных элементов. В докладе будет рассказано о нескольких недавних результатах:

1. Новых химических явлениях: открытии прозрачного неметаллического аллотропа натрия, неожиданных новых хлоридов натрия, и соединений гелия под давлением.
2. Предсказание и экспериментальное получение новых высокотемпературных сверхпроводников, приближающихся к комнатной сверхпроводимости.
3. Предсказание новых неожиданных стабильных составов наночастиц и возможное объяснение канцерогенности оксидной пыли.

Особое внимание будет уделено нерешенным проблемам, связанным с пониманием новых классов соединений, а также нынешним ограничениям и будущему методов предсказания структуры вещества.