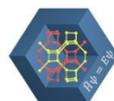




САМАРСКИЙ  
ПОЛИТЕХ  
Опорный университет



**Samara Center**  
for Theoretical Materials Science

# Что такое материалы?



$\tau$

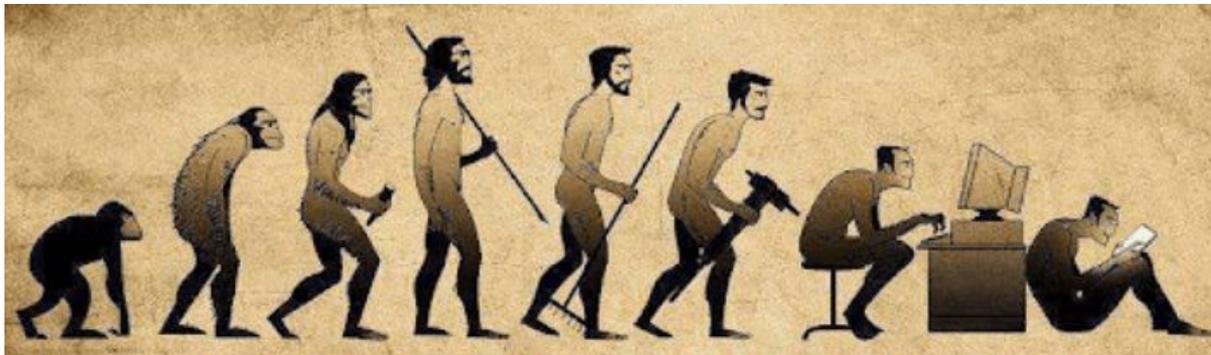
$\pi$

$\chi$

# ЧТО ТАКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

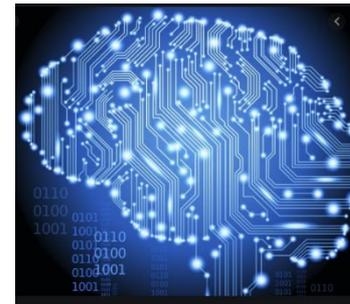
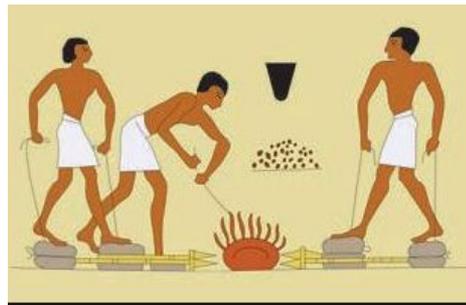
Любой вид человеческой деятельности, начиная с производства пищи и кончая запуском космических ракет, так или иначе связан с потреблением материалов. В основе производства абсолютно всех видов материалов лежат химические процессы.

Академик В.А. Легасов



Материал - это вещество, обладающее свойствами, которые определяют то или иное его практическое применение.

И.В.Тананаев



## Конструкционные

**Материалы, из которых изготавливаются детали конструкций (машин и сооружений), воспринимающих силовую нагрузку.**

Механические свойства

Прочность

Вязкость

Надежность

Ресурс



## Функциональные

**Материалы, характеризующиеся ярко выраженным свойством и предназначенные для создания специализированных изделий и устройств.**

Электрические свойства

Диэлектрические свойства

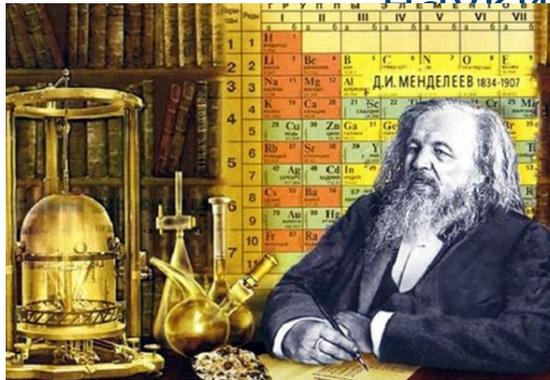
Адсорбционные свойства

Магнитные свойства

Оптические свойства

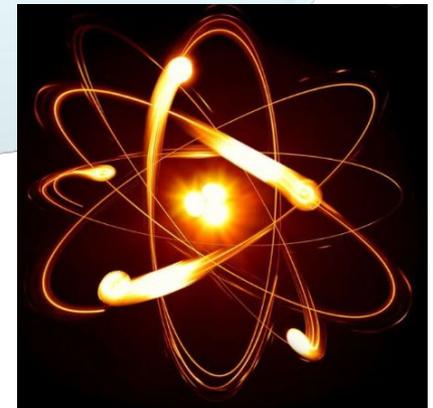


# Развитие



Классификация

Создание  
теории



Сбор  
экспериментальных  
фактов



NEW RELEASE

# CSD 2021.1 Release available now.



FIZ Karlsruhe – Leibniz Institute for Information Infrastructure

[ABOUT](#) [ICSD PRODUCTS](#) [HOW TO USE](#) [SUPPORT](#) [CRYSTAL STRUCTURE DEPOT](#)

## ICSD - the world's largest database for completely identified inorganic crystal structures

FIZ Karlsruhe provides the scientific and the industrial community with the world's largest database for completely identified inorganic crystal structures, ICSD. The ICSD data are of excellent quality and its first records date back to 1913. Only data which have passed thorough quality checks are included.

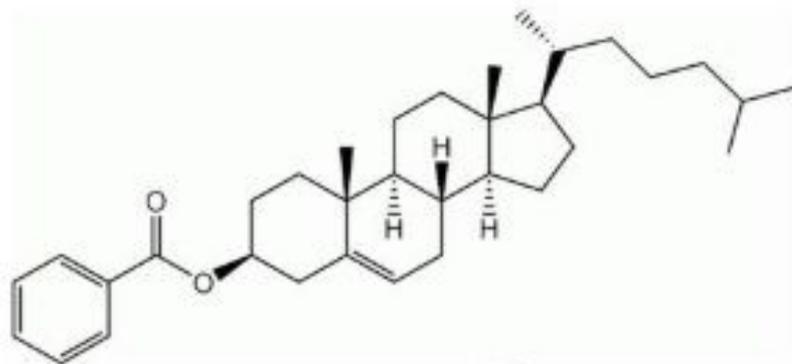
06.05.2021

### ICSD now contains 242,828 crystal structures

The ICSD database now contains 242,828 crystal structures.

[read more](#)[Show all ICSD News](#)

## История: открытие жидких кристаллов



холестерилбензоат

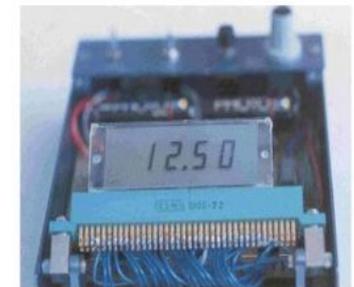
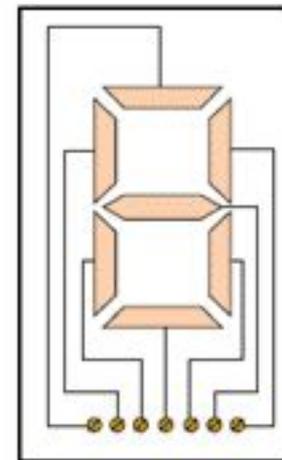
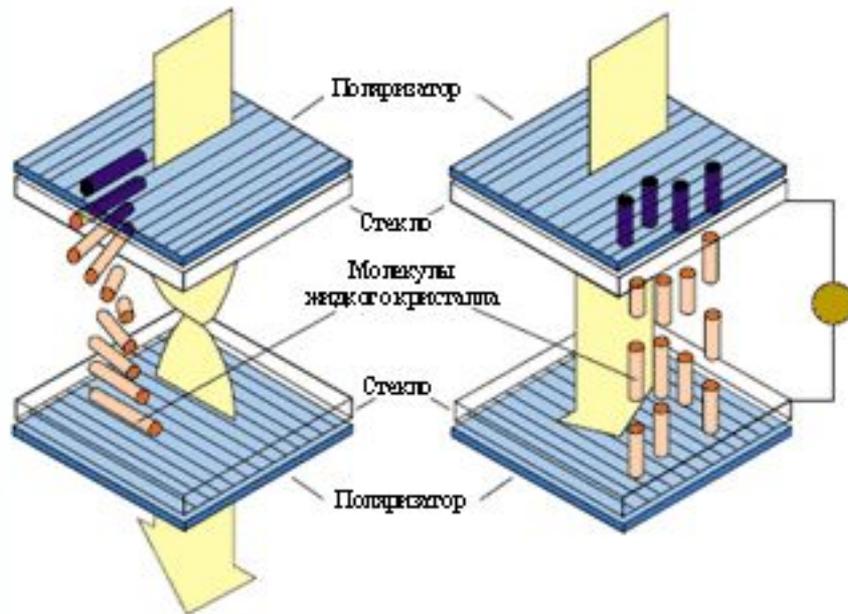


Фридрих Рейнитцер  
1888 г.



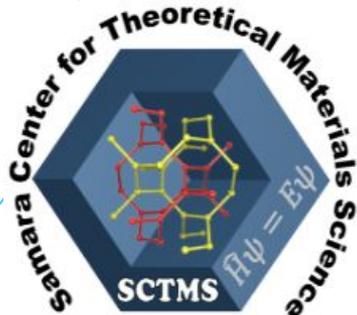
## Переход Фредерикса

- Устройство ЖК-индикатора (ЖК-дисплея)



The first twisted nematic display (TN/LCD) prototype, made in 1971.

# Межвузовский научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению (МНИЦТМ)



<http://sctms.ru>

<http://topospro.com>

2838

пользователей из 97 стран

[Topocryst.com](http://topocryst.com) - free service for determining the underlying topology of your crystal structure



Upload CIF file



the topological type  
(example)

ftw

H-bonded molecular MOFs,  
standard representation

Upload CIF file and get the topological type of your crystal structure **for free**

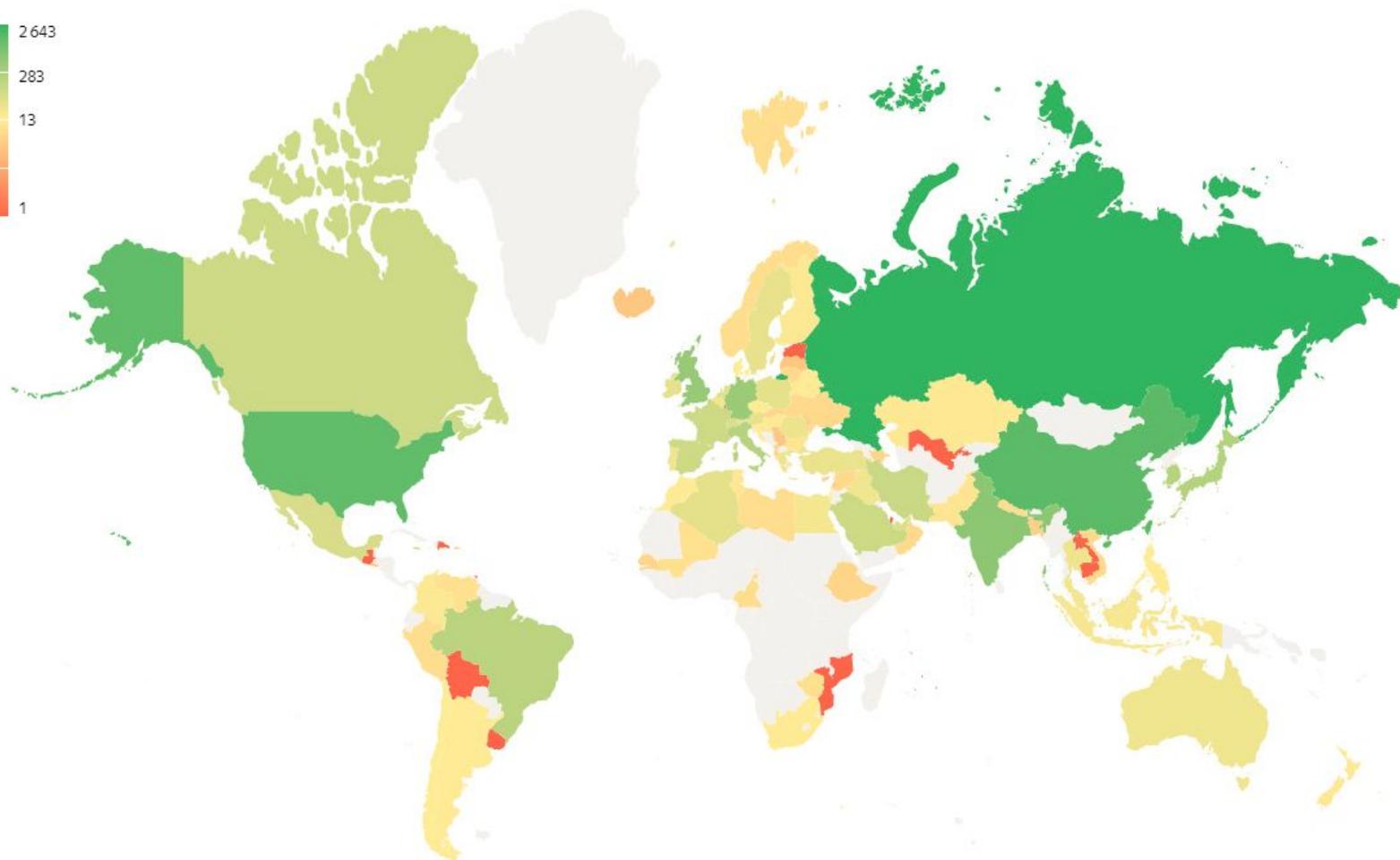
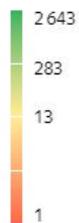
ToposPro

About

Latest version: 5.4.1.0

ToposPro is a program package for comprehensive analysis of geometrical and topological properties of periodic structures

# Международное сотрудничество



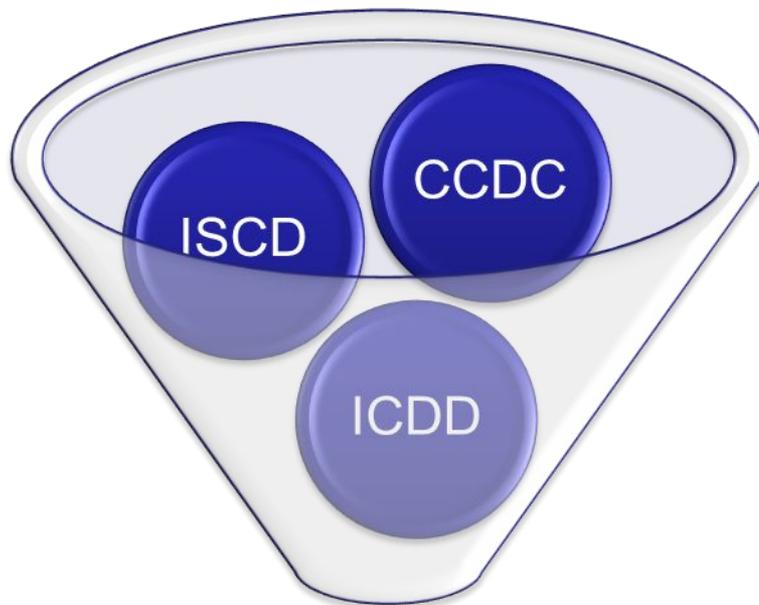
# Международное сотрудничество



САМАРСКИЙ  
ПОЛИТЕХ  
Опорный университет

Китай	17,7%	Польша	0,66%	Чехия	0,23%	Азербайджан	0,04%	Тринидад и Тобаго	0,02%
США	15,9%	Австрия	0,41%	Чили	0,16%	Албания	0,02%	Узбекистан	0,02%
Индия	6,09%	Швеция	0,46%	Аргентина	0,18%	Сенегал	0,05%	Уругвай	0,02%
Великобритания	4,22%	Турция	0,53%	Филиппины	0,2%	Словакия	0,07%	Эстония	0,02%
Германия	4,79%	Греция	0,44%	Казахстан	0,14%	Эфиопия	0,05%		
Япония	2,54%	Румыния	0,35%	Новая Зеландия	0,16%	Бангладеш	0,05%		
Италия	2,68%	Таиланд	0,3%	Словения	0,05%	Кипр	0,05%		
Южная Корея	1,93%	Австралия	0,46%	Тунис	0,11%	Молдова	0,05%		
Бразилия	2,01%	Португалия	0,25%	Болгария	0,11%	Пуэрто-Рико	0,04%		
Иран	1,08%	Ирак	0,32%	Пакистан	0,14%	Исландия	0,04%		
Саудовская Аравия	0,55%	Бельгия	0,39%	Венесуэла	0,05%	Латвия	0,04%		
Тайвань	1,22%	Малайзия	0,32%	Зимбабве	0,09%	Ливан	0,04%		
Франция	1,33%	Египет	0,21%	Мали	0,02%	Сальвадор	0,02%		
Канада	1,42%	Индонезия	0,28%	Камерун	0,04%	Сербия	0,04%		
Испания	1,35%	Финляндия	0,34%	Ливия	0,04%	Боливия	0,02%		
Ямайка	0,14%	Колумбия	0,14%	Непал	0,04%	Гватемала	0,02%		
Мексика	0,78%	Хорватия	0,21%	Норвегия	0,09%	Доминиканская Республика	0,02%		
Швейцария	0,71%	Венгрия	0,16%	Перу	0,11%	Камбоджа	0,02%		
Объединённые Арабские Эмираты	0,99%	ОАЭ	0,14%	Вьетнам	0,09%	Катар	0,02%		
Нидерланды	0,85%	Беларусь	0,16%	Литва	0,07%	Лаос	0,02%		
Сингапур	0,43%	Марокко	0,23%	Оман	0,07%	Люксембург	0,02%		
Алжир	0,28%	Дания	0,18%	Сирия	0,07%	Маврикий	0,02%		

# Кристаллохимический анализ



ToposPro



Соединения с нужными  
свойствами

# Этапы работы





# Расчет физических свойств

## Вычислительный кластер



### Конфигурация

- Более **1300** процессоров (ядер) x64 (x86\_64) с тактовыми частотами выше 2ГГц, из них:
  - более **800** с поддержкой расширенного набора инструкций AVX
  - более **500** с поддержкой расширенного набора инструкций AVX2
- более **12** ТБ оперативной памяти
- интерконнект – **56** Гбит/с non-blocking FDR Infiniband
- сеть передачи файлов – **10** Гбит/с Ethernet

### Производительность

- общая (LINPACK) – **23** TFLOPS
- отдельных вычислительных узлов в SMP-задачах – **450-700** GFLOPS
- системы хранения: чтение – до **1** ГБ/с, запись – **300** МБ/с

### Программное обеспечение

#### (Расчет структуры и свойств веществ и материалов)

- Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)
- Gaussian 09 + GaussView
- Crystal14
- cp2k
- Siesta
- QuantumEspresso
- DFTB+
- Wien2k
- LAMMPS
- GROMACS
- GULP

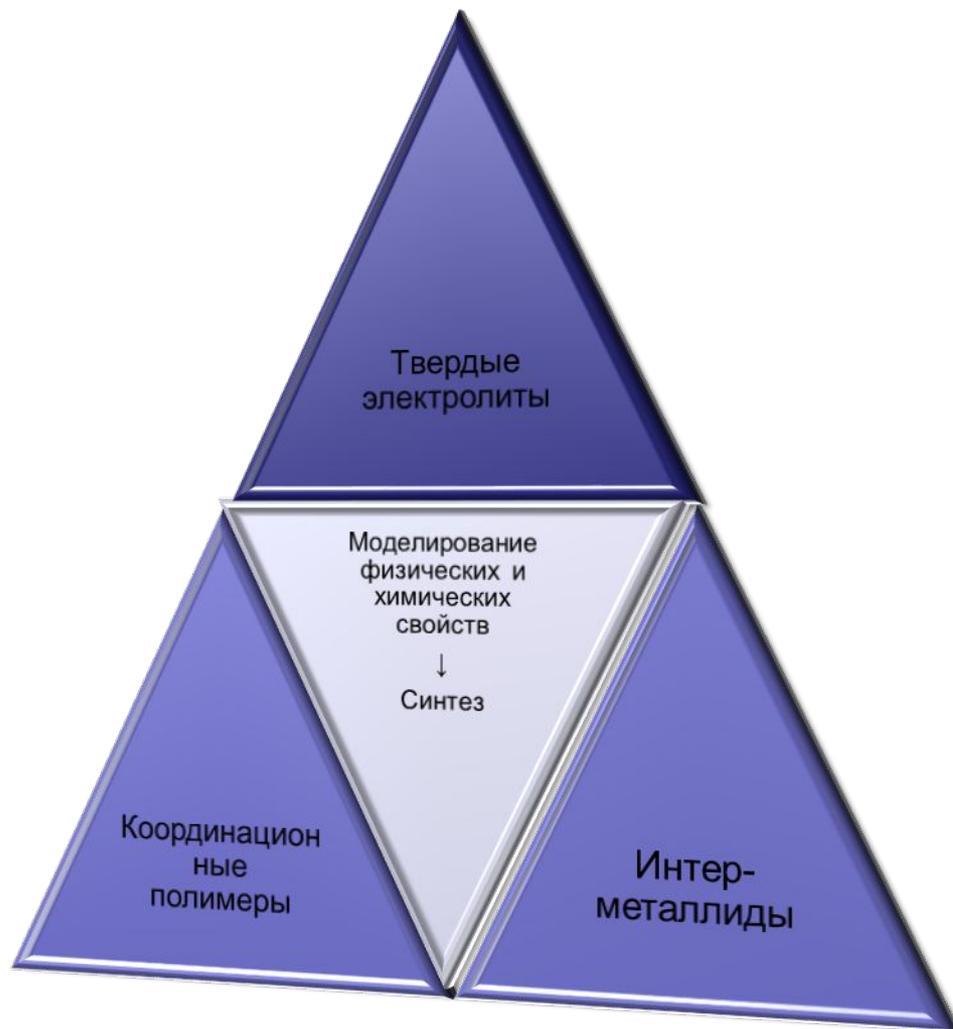


# Синтез вещества

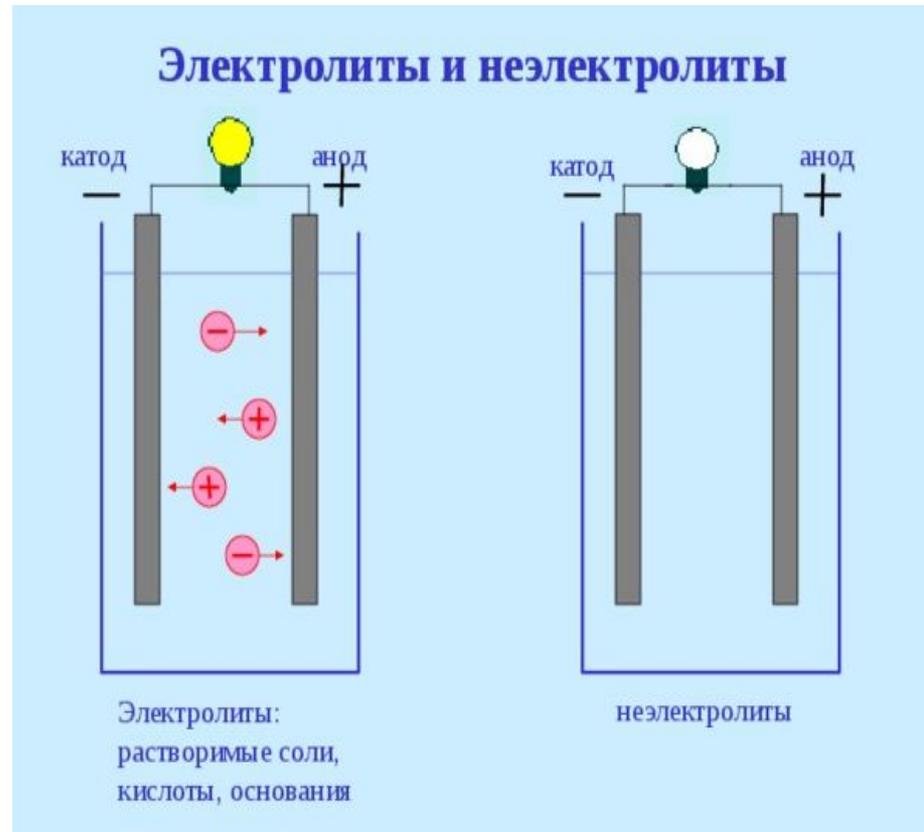
Лаборатории по синтезу координационных полимеров/  
твердых электролитов / интерметаллидов



# Научные направления



# Твердые электролиты



**Электролиты – вещества содержащие ионы и способные за счет движения ионов проводить ток**

## Твердые электролиты

**Твердые электролиты (ионные проводники, суперионники) – твердофазные (кристаллические, поликристаллические или аморфные - стеклообразные) материалы, в которых ионы одной из подрешеток обладают достаточно большой подвижностью, что обуславливает величины проводимости, сравнимые с характеристиками сильных жидких электролитов ( $\sim 10^{-3} - 10 \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ ).**



# Литий-ионные аккумуляторы

## ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ РЯД

Li	→	3.04 V
Mg	→	2.37 V
Al	→	1.66 V
Zn	→	0.76 V
Fe	→	0.44 V
H	→	0 V
Hg	→	-0.24 V
Cu	→	-0.34 V
Ag	→	-1.69 V
F	→	-2.8 V



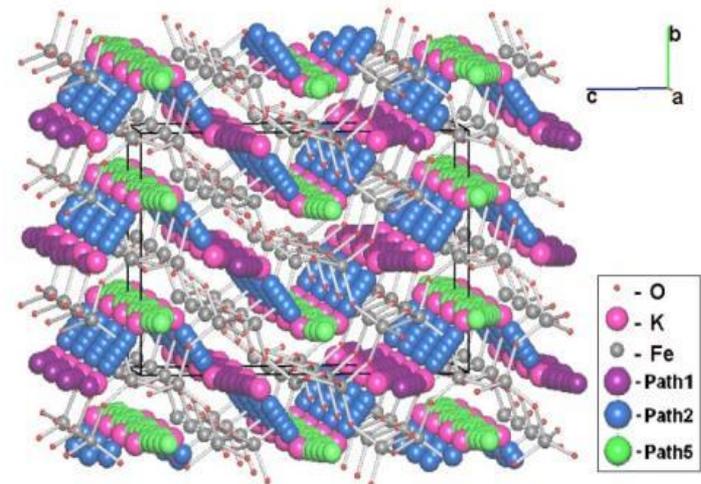
# Твердые электролиты

	Li	Na	K
Ионный радиус, Å	0.76 (КЧ 6)	1.02 (КЧ 6)	1.34 (КЧ 8)
Атомный вес, г/моль	6.9	23	39
$E^0$ отн. $H^+/H_2$ (вода), В	-3.04	-2.71	-2.94
$E^0$ отн. $H^+/H_2$ (пропиленкарбонат), В	-2.79	-2.56	-2.88
Температура плавления, °С	180	98	64
Распространенность в земной коре, г/кг	0.02	23.6	23.2
Рыночная цена $A_2CO_3$ , €/кг	4.11-4.49	0.07-0.37	0.10-0.50



## Наши партнеры

- ❑ Технический университет Фрайбергской горной академии (Германия)
- ❑ Кафедра электрохимии МГУ им. М.В. Ломоносова
- ❑ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника», г. Москва
- ❑ Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург
- ❑ Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна
- ❑ Университет г. Турин (Италия)



## BatteryMaterials 1.3

[Home](#)   [Upload new data](#)   [Release Notes](#)

Combining topological methods, high-performance supercomputing and density functional theory-based calculations, the Battery Materials project provides an open-access to databases of known and newly predicted ion-conducting crystals and their properties.

### Search



ICSD    Battery Materials Database

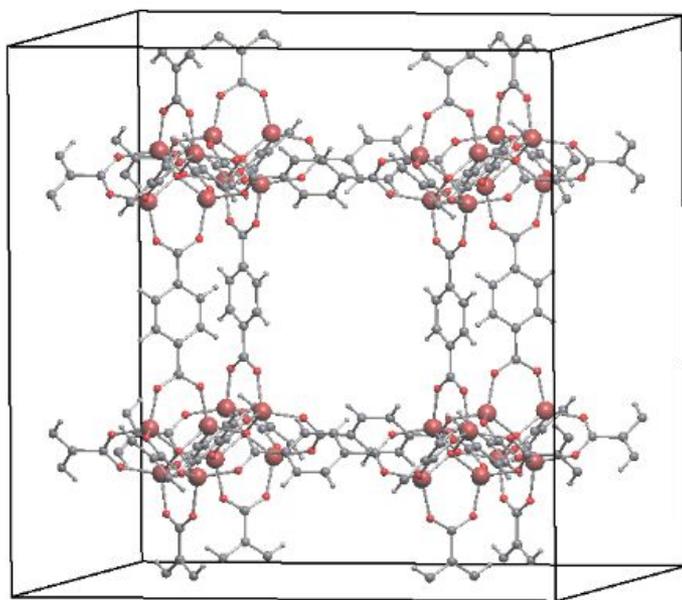
or

Please, select type of working ion

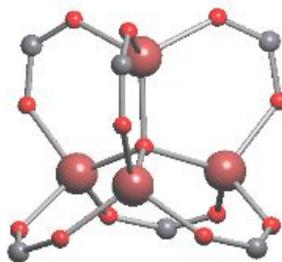
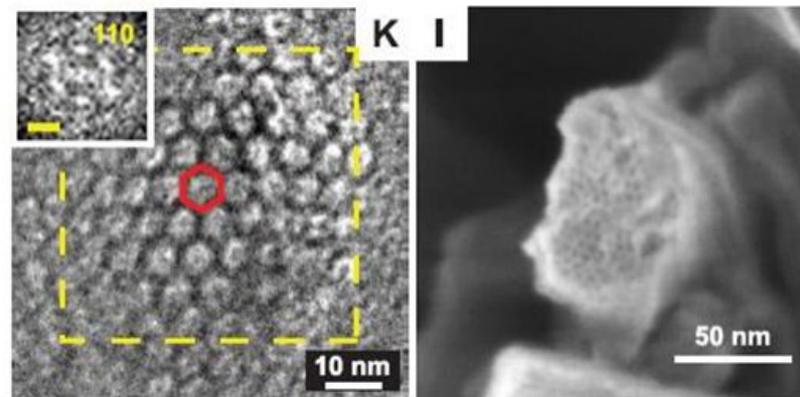
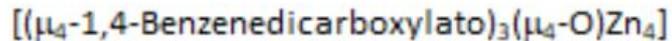
1 H Hydrogen																	2 He Helium
3 Li Lithium	4 Be Beryllium											5 B Boron	6 C Carbon	7 N Nitrogen	8 O Oxygen	9 F Fluorine	10 Ne Neon
11 Na Sodium	12 Mg Magnesium											13 Al Aluminum	14 Si Silicon	15 P Phosphorus	16 S Sulfur	17 Cl Chlorine	18 Ar Argon
19 K Potassium	20 Ca Calcium	21 Sc Scandium	22 Ti Titanium	23 V Vanadium	24 Cr Chromium	25 Mn Manganese	26 Fe Iron	27 Co Cobalt	28 Ni Nickel	29 Cu Copper	30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Selenium	35 Br Bromine	36 Kr Krypton
37 Rb Rubidium	38 Sr Strontium	39 Y Yttrium	40 Zr Zirconium	41 Nb Niobium	42 Mo Molybdenum	43 Tc Technetium	44 Ru Ruthenium	45 Rh Rhodium	46 Pd Palladium	47 Ag Silver	48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Tin	51 Sb Antimony	52 Te Tellurium	53 I Iodine	54 Xe Xenon
55 Cs Cesium	56 Ba Barium	57-71 La-Lu	72 Hf Hafnium	73 Ta Tantalum	74 W Tungsten	75 Re Rhenium	76 Os Osmium	77 Ir Iridium	78 Pt Platinum	79 Au Gold	80 Hg Mercury	81 Tl Thallium	82 Pb Lead	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium	85 At Astatine	86 Rn Radon
87 Fr Francium	88 Ra Radium	89-103 Ac-Lr	104 Rf Rutherfordium	105 Db Dubnium	106 Sg Seaborgium	107 Bh Bohrium	108 Hs Hassium	109 Mt Meitnerium	110 Ds Darmstadtium	111 Rg Roentgenium	112 Cn Copernicium	113 Nh Nihonium	114 Fl Flerovium	115 Mc Moscovium	116 Lv Livermorium	117 Ts Tennessine	118 Og Oganesson
		57 La Lanthanum	58 Ce Cerium	59 Pr Praseodymium	60 Nd Neodymium	61 Pm Promethium	62 Sm Samarium	63 Eu Europium	64 Gd Gadolinium	65 Tb Terbium	66 Dy Dysprosium	67 Ho Holmium	68 Er Erbium	69 Tm Thulium	70 Yb Ytterbium	71 Lu Lutetium	

# Металл-органические каркасы

*Металл-органические каркасы* – потенциально пористые сшитые периодичные координационные полимеры, построенные из органических лигандов и катионов металлов.



MOF-5



Комплексная группировка



Линкер

## Хранение водорода

### 1. Сжижение газа

Температура кипения 20 К  
Критическая температура 38 К  
Плотность 70.8 кг/м<sup>3</sup> при 20 К и 1 атм  
1–2 кг на 100 км пути

### 2. Сжатие газа

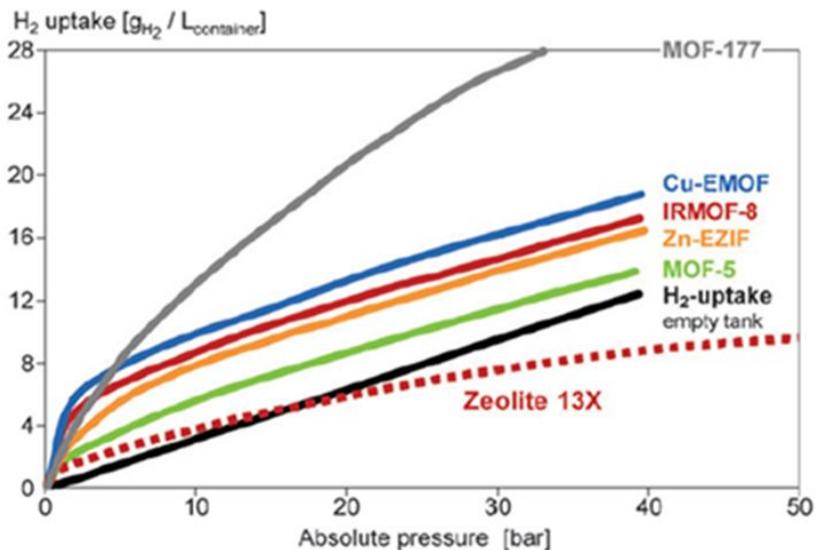
### 3. Адсорбция газа

Емкость существующих танкеров

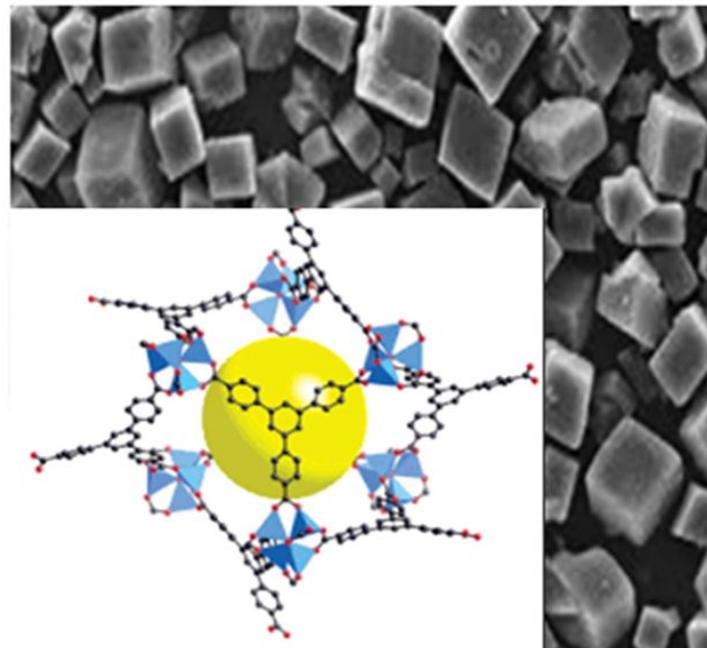
3.4–4.7 масс.% и 14–28 кг/м<sup>3</sup>

Цель: 81 кг/м<sup>3</sup>

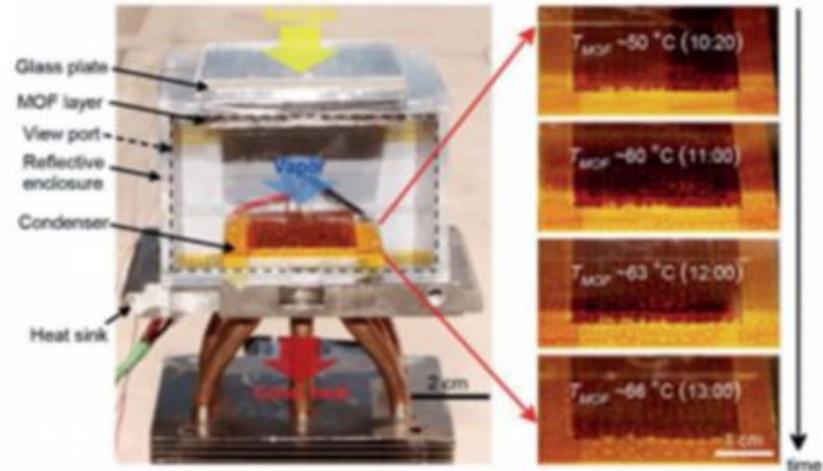
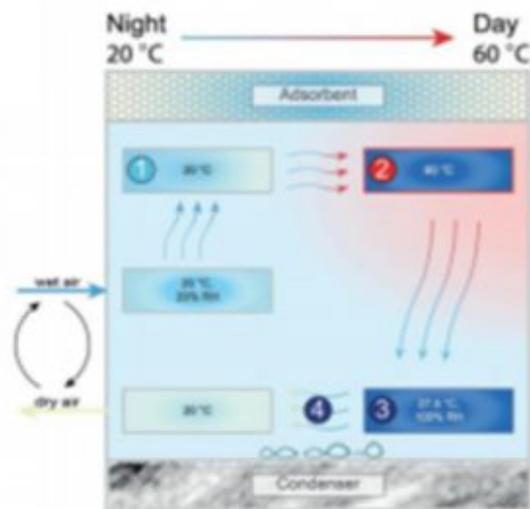
[O. M. Yaghi et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005, 44, 4670]



MOF-177 ZnO<sub>4</sub>(BTB)<sub>2</sub> BTB - 1, 3, 5-трибензоатбензол



## Извлечение воды из воздуха в пустыне



<https://www.youtube.com/watch?v=-6T3ICXWqjc> *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1704304

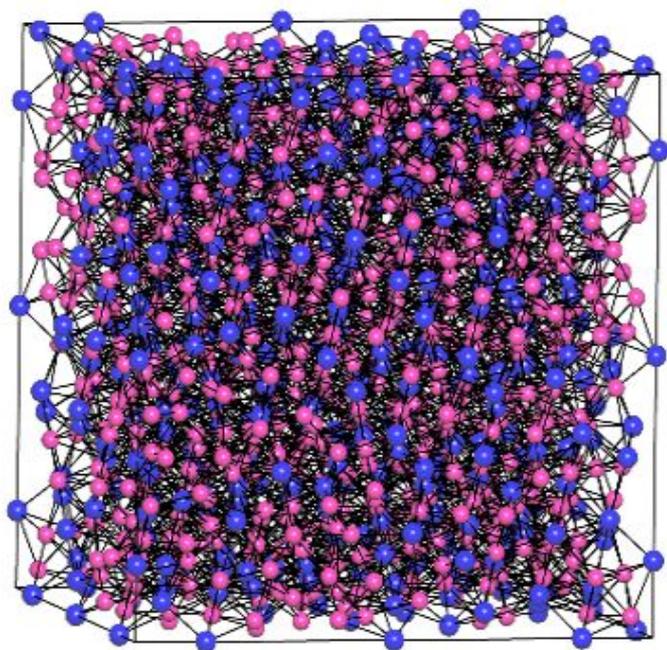
<https://www.youtube.com/watch?v=dvwmZKqPgKQ>

## Наши партнеры

- Университет г. Милан (Италия)
- Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, г. Москва
- Институт неорганической химии имени А. В. Николаева СО РАН
- Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН
- Университет г. Дрезден (Германия)
- Самарский филиал ФИАН
- Университет сельского хозяйства и технологий г. Токио (Япония)
- Самарский государственный медицинский университет

## Наши партнеры

- Университет Генуи, Италия
- Университет Милана, Италия
- Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова  
Российской академии наук (ИХС РАН) г. Санкт-Петербург

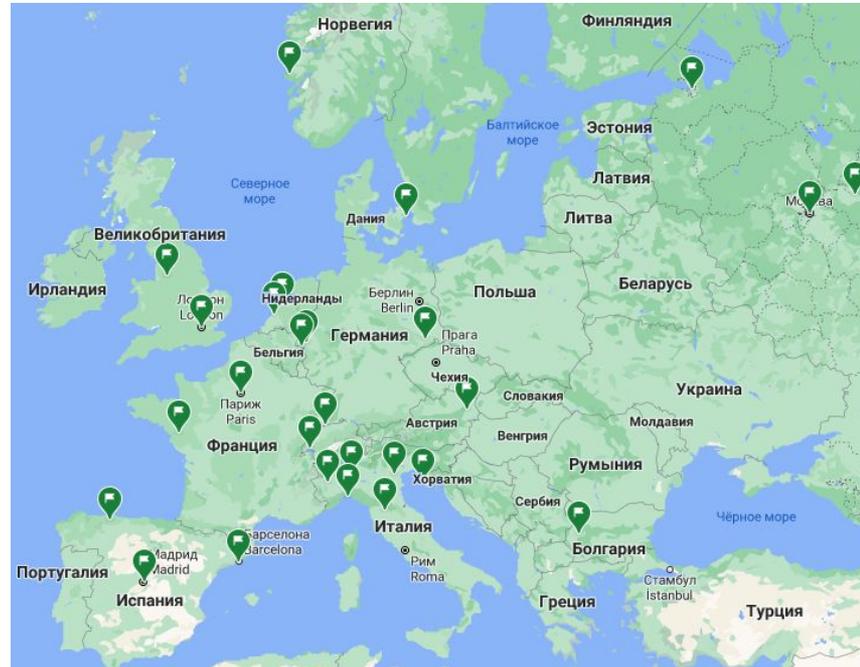


● - Na  
● - Cd



## Международное сотрудничество

25 стажировок  
в ведущих  
Европейских  
центрах



15 визитов  
зарубежных  
партнеров

9 устных докладов студентов на  
международных конференциях

## Татьяна Ахметшина

- Пришла в МНИЦТМ на 2 курсе
- Первая опубликованная научная работа – через год
- Статья в топовом научном журнале – еще через 2.5 года
- Сейчас – аспирантка в Цюрихском технологическом

**Inorganic Chemistry**

Article

pubs.acs.org/IC

**IF = 4.794**

### A Collection of Topological Types of Nanoclusters and Its Application to Icosahedron-Based Intermetallics

Arina A. Pankova,<sup>†</sup> Tatiana G. Akhmetshina,<sup>†</sup> Vladislav A. Blatov,<sup>\*,†,‡</sup> and Davide M. Proserpio,<sup>†,§</sup>

<sup>†</sup>Samara Center for TI

<sup>‡</sup>Dipartimento di Chir

**ACCOUNTS**  
of chemical research

Article

Cite This: *Acc. Chem. Res.* 2018, 51, 21–30

pubs.acs.org/accounts

**IF = 20.268**

### Topology of Intermetallic Structures: From Statistics to Rational Design

*Published as part of the Accounts of Chemical Research special issue "Advancing Chemistry through Intermetallic Compounds".*

Tatiana G. Akhmetshina,<sup>†,‡</sup> Vladislav A. Blatov,<sup>\*,†,‡,§</sup> Davide M. Proserpio,<sup>†,§</sup>  
and Alexander P. Shevchenko<sup>†,‡,§</sup>

<sup>†</sup>Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS), Samara University, Ac. Pavlov St. 1, Samara 443011, Russia

<sup>‡</sup>Samara State Technical University, Molodogvardeyskaya St. 244, Samara 443100, Russia

<sup>§</sup>Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Via C. Golgi 19, 20133 Milano, Italy

## Павел Золотарев

- ❑ В МНИЦТМ с самого начала (студент 5 курса)
- ❑ Первая опубликованная научная работа – через 8 месяцев
- ❑ Прогноз и успешный синтез расслаивающихся и гнущихся кристаллов для Миланского университета
- ❑ Сейчас – к.х.н., научный сотрудник МНИЦТМ

CRYSTAL  
GROWTH  
& DESIGN

Article

pubs.acs.org/crystal

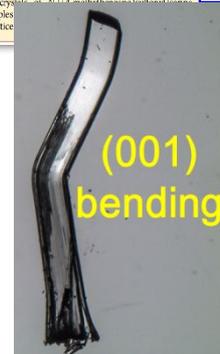
### A Possible Route toward Expert Systems in Supramolecular Chemistry: 2-Periodic H-Bond Patterns in Molecular Crystals

Pavel N. Zolotarev,<sup>†</sup> Muhammad Nadeem Arshad,<sup>‡,§</sup> Abdullah M. Asiri,<sup>‡,§</sup> Zahra M. Al-amshany,<sup>‡</sup> and Vladislav A. Blatov<sup>\*,†,‡</sup>

<sup>†</sup>Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS), Samara State University, Ac. Pavlov St. 1, Samara 443011, Russia

<sup>‡</sup>Chemistry Department, Faculty of Science, King Abdulaziz University, P.O. Box 80203, Jeddah 21589, Saudi Arabia

<sup>§</sup>Centre of Excellence for Advanced Materials Research (CEAMR), King Abdulaziz University, P.O. Box 80203, Jeddah 21589, Saudi Arabia



CRYSTAL  
GROWTH  
& DESIGN

Article

pubs.acs.org/crystal

### A Possible Route toward Expert Systems in Supramolecular Chemistry: 2-Periodic H-Bond Patterns in Molecular Crystals

Pavel N. Zolotarev,<sup>†</sup> Muhammad Nadeem Arshad,<sup>‡,§</sup> Abdullah M. Asiri,<sup>‡,§</sup> Zahra M. Al-amshany,<sup>‡</sup> and Vladislav A. Blatov<sup>\*,†,‡</sup>

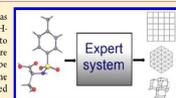
<sup>†</sup>Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS), Samara State University, Ac. Pavlov St. 1, Samara 443011, Russia

<sup>‡</sup>Chemistry Department, Faculty of Science, King Abdulaziz University, P.O. Box 80203, Jeddah 21589, Saudi Arabia

<sup>§</sup>Centre of Excellence for Advanced Materials Research (CEAMR), King Abdulaziz University, P.O. Box 80203, Jeddah 21589, Saudi Arabia

#### Supporting Information

**ABSTRACT:** A novel approach to prediction of supramolecular motifs was applied to more than 6000 monomolecular structures containing 2-periodic H-bond patterns. It is shown that a number of topological descriptors allow one to rationalize supramolecular motifs, find the regularities in their structure, and store the information in a knowledge database. The knowledge database can then be used in an expert system to mimic the work of a human expert and to forecast the method of assembling molecules into supramolecular ensembles and into extended (periodic) architectures. The crystals and their corresponding supramolecular motifs were synthesized, and the principles of the expert system were demonstrated. The expert system can predict the 2-periodic square-lattice



## Что требуется от студентов?

- Увлеченность наукой – пробный период 1-2 месяца
- Разговорный английский – не позже, чем через год
- Зарубежные командировки (конференции, стажировки) - не менее одной в год после первого года работы
- Научные статьи в ведущих международных журналах - не менее одной в год после первого года работы

## Что поощряется?

### Самостоятельность

- Свои идеи
- Поиск новых тем и самообразование
- Сольные публикации
- Самостоятельный поиск научных контактов
- Участие в конкурсах с собственными проектами

$x$

**СПАСИБО**

Самарский государственный  
технический университет

<https://samgtu.ru/>

$\pi$



$\tau$