VINIF

DỰ ÁN:

KHÁM PHÁ CÁC VẬT LIỆU CHỨC NĂNG MỚI BẰNG TIẾP CẬN HỌC MÁY
NOVEL FUNCTIONAL MATERIALS DISCOVERY BY MACHINE-LEARNING APP

Tổ chức chủ trì: **ĐH Bách Khoa Hà Nội (HUST)**

Chủ nhiệm dự án: **GS.TS. Vũ Ngọc Tước (HUST)**
Dr. Huan Tran D. (GA Tech - USA)

MÃ SỐ **VINIF.2019.DA03**

TÓM TẮT VỀ DỰ ÁN

Long-term plan: introduce a new highly-interdisciplinary research area, Materials Informatics, a sub-field of Materials Science and Engineering based on Artificial Intelligence and learning Big Data by computer algorithms, to Vietnamese scientist community.

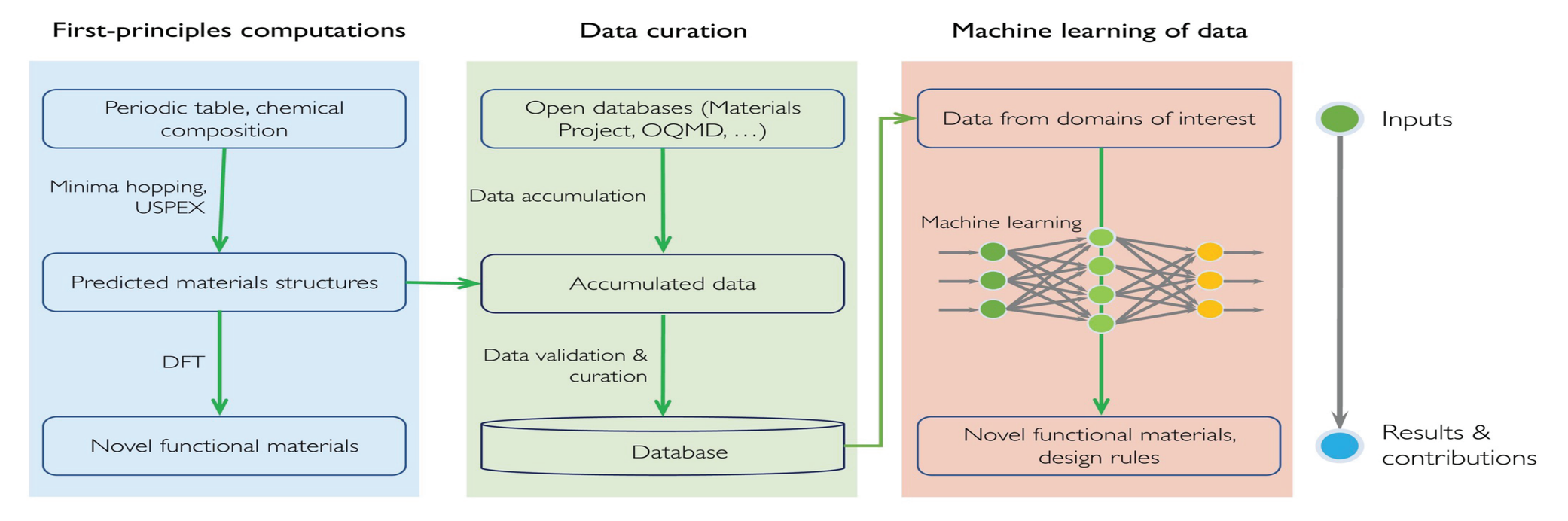
Immediate goals

- Carry out high-quality research in materials discovery and learning materials data.
- Develop a database of at least 10,000 functional materials structures and accompanied properties, and make it freely available.
- Further contribute to the community by training students, organizing seminars and tutorials in materials informatics, and collaborating with other scientists in Vietnam if common interest is found.
- Develop and maintain a research thrust in Materials Informatics within the PI's group, motivating other Vietnamese groups to involve in this highly-interdisciplinary field.
- Three lines of activities, including (1) materials discovery by structure prediction methods, (2) data curation, taking inputs from line 1 and other sources, and (3) learning the obtained data for structure-properties relations and design rules

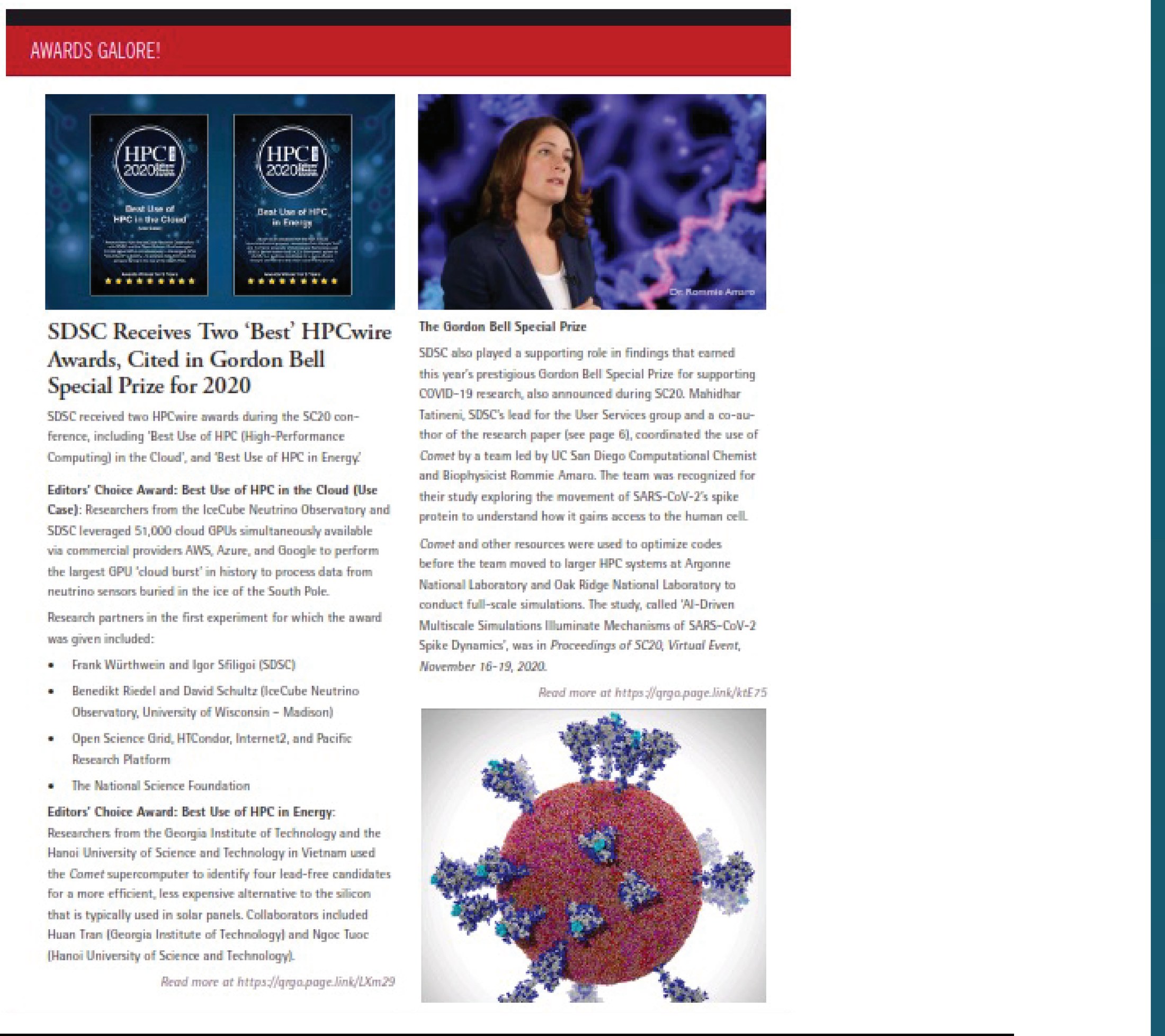
THÔNG TIN NỔI BẬT VỀ DỰ ÁN

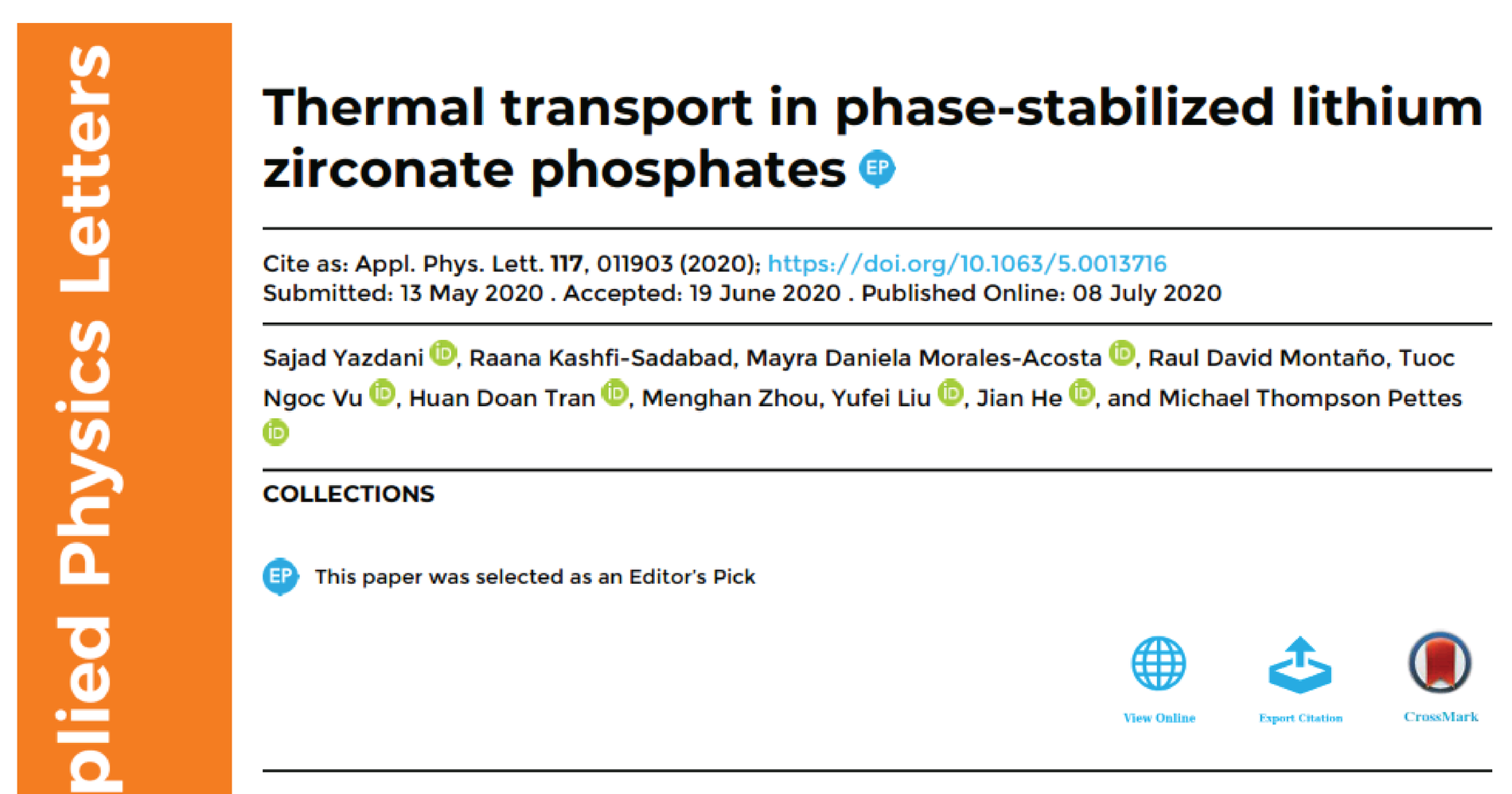
Công bố 06 bài báo quốc tế (05 SJR Q1, 01 SJR Q2):
(1) V.N. Tuoc, T.D. Huan, Lead-free hybrid organic-inorganic perovskites for solar cell applications, J. Chem. Phys. 152, 014104 (2020) SJR **Q1**, Impact factor: **4.3**
(2) S. Yazdani, V.N. Tuoc , R.K. Sadabad, M.D. Morales-Acosta, Huan T.D., M. Zhou, Y. Liu , J. He, R.D. Montaño, M.T. Pettes, Thermal transport in phase-stabilized lithium zirconate phosphates Appl. Phys. Lett. 117, 011903 (2020) SJR **Q1**, Impact factor: **3.97**
(3) V.N.Tuoc, N.T. Thao, L.T.H. Lien, P.T. Liem 'Novel Chain and Ribbon ZnO Nanoporous Crystalline Phases in Cubic Lattice. Phys. Stat. Solidi B, 2100067 (2021) 0370-1972, SJR Q2, Impact factor: **1.86**
(4) Minh T. P, E. Amerling, Anh. T. Ngo, Hoang M. Luong, K. Hansen, Huy T. P., Tuoc N. Vu, Huan Tran, L. Whittaker-Brooks, and Tho D. Nguyen Strong Rashba-Dresselhaus Effect in Non-chiral 2D Ruddlesden-Popper Perovskites, 2021 Adv. Optical Mater. 2021, 2101232, SJR **Q1**, Impact factor: **9.93**
(5) V.N. Tuoc, Nga T. T. Nguyen, V. Sharma, and T.D. Huan, Probabilistic deep learning approach for targeted hybrid organic-inorganic perovskites, Physical Review Materials, 5, 125402 (2021)SJR **Q1**, Impact factor: **3.98**
(6) T.D. Huan, V.N. Tuoc, Machine-learning approach for discovery of conventional superconductors, Physical Review Materials, 7, 054805 (2023), SJR **Q1**, Impact factor: **3.98**
Bộ cơ sở dữ liệu cấu trúc: Năm 2020 là http://www.godeepdata.org/ và từ 2021 chuyển sang host mới là http://matsml.org/index_files/data.html (bao gồm 07 data set ~ 10k cấu trúc)
Bộ công cụ: Bộ công cụ phần mềm để nghiên cứu vật liệu bằng phương pháp học máy - Machine learning toolkit for materials science (MATSML) được chia xẻ miễn phí cho cộng đồng htts://github.com/huantd/matsml
Hội thảo quốc tê: 03 nternational Symposium on Materials Informatics 2020 hosted by Japan Advanced Institute of Science and Technology (JAIST); Joint 5th International Symposium on Frontiers in Materials Science & 3rd Interna-tional Symposium on Nano-materials, Technology and Applications (FMS-NANOMATA 2019) and (FMS-2022).
Đào tạo: 01 Thạc sỹ Vật lý lý thuyết và Vật lý Toán - đã bảo vệ 6/2021.
Giải thưởng:
Các cấu trúc mới dự đoán trong (1) đã được đưa tin trên trang của UCSD News [https://ucsdnews.ucsd.edu /pressrelease /georgia-tech-engineers-simulate-solar-cell-work-using-supercomputers].
Công bố (2) được Biên tập của J. Appl. Phys. Lett. chọn là công bố tiêu biểu (Editor's Pick – EP) [https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/5.0013716].
Bài báo số 1 được Ban Biên tập của Tạp chí HPC Wire bình chọn cho Giải thưởng "Best Use of HPC in Energy" [link giải thưởng https://www.hpcwire.com/readers-and-editors-choice-awards-2020-winners/; link trao giải https://youtu.be/EnV5cEiFjzA]

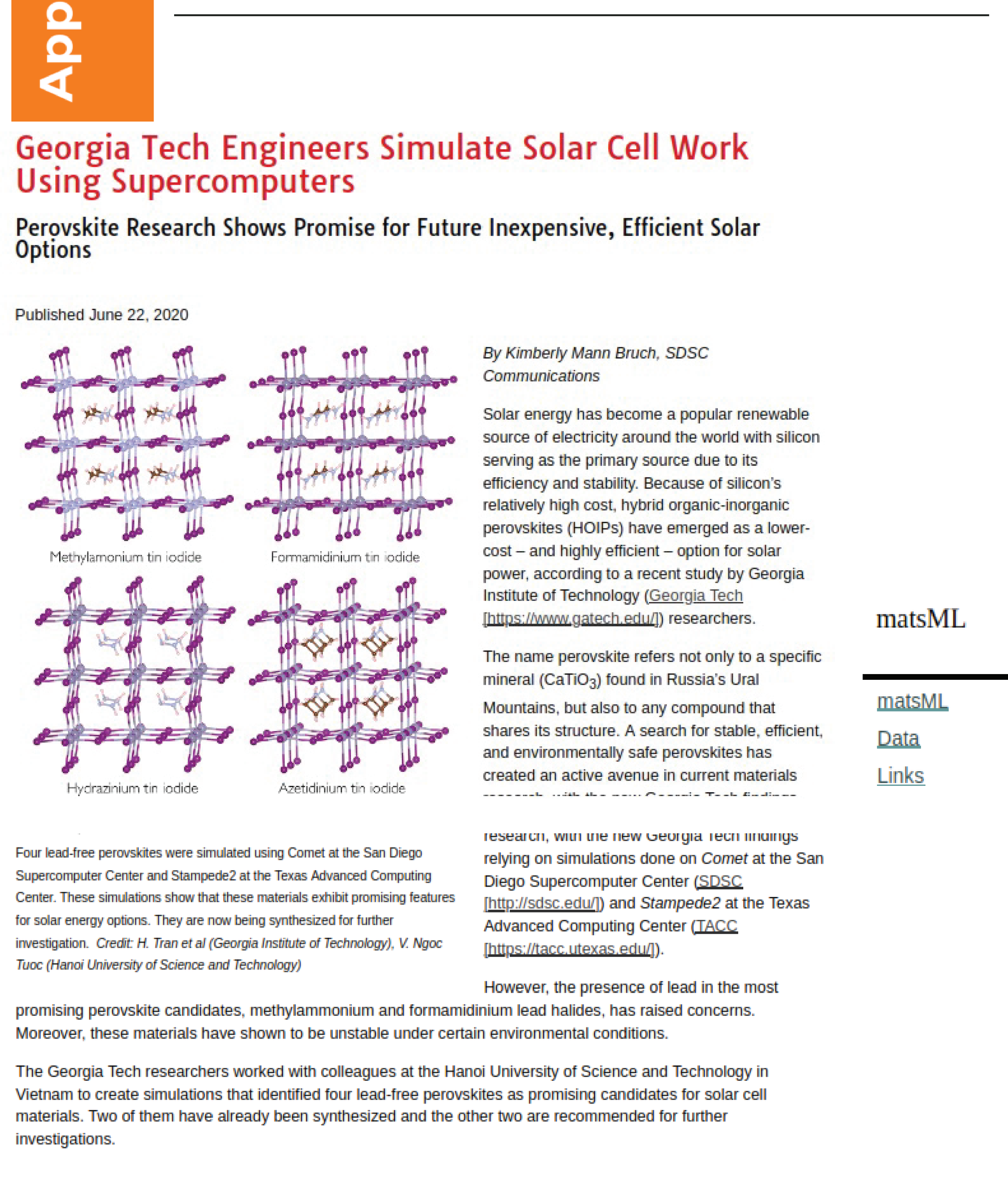
HÌNH ẢNH ĐẠI DIỆN DỰ ÁN

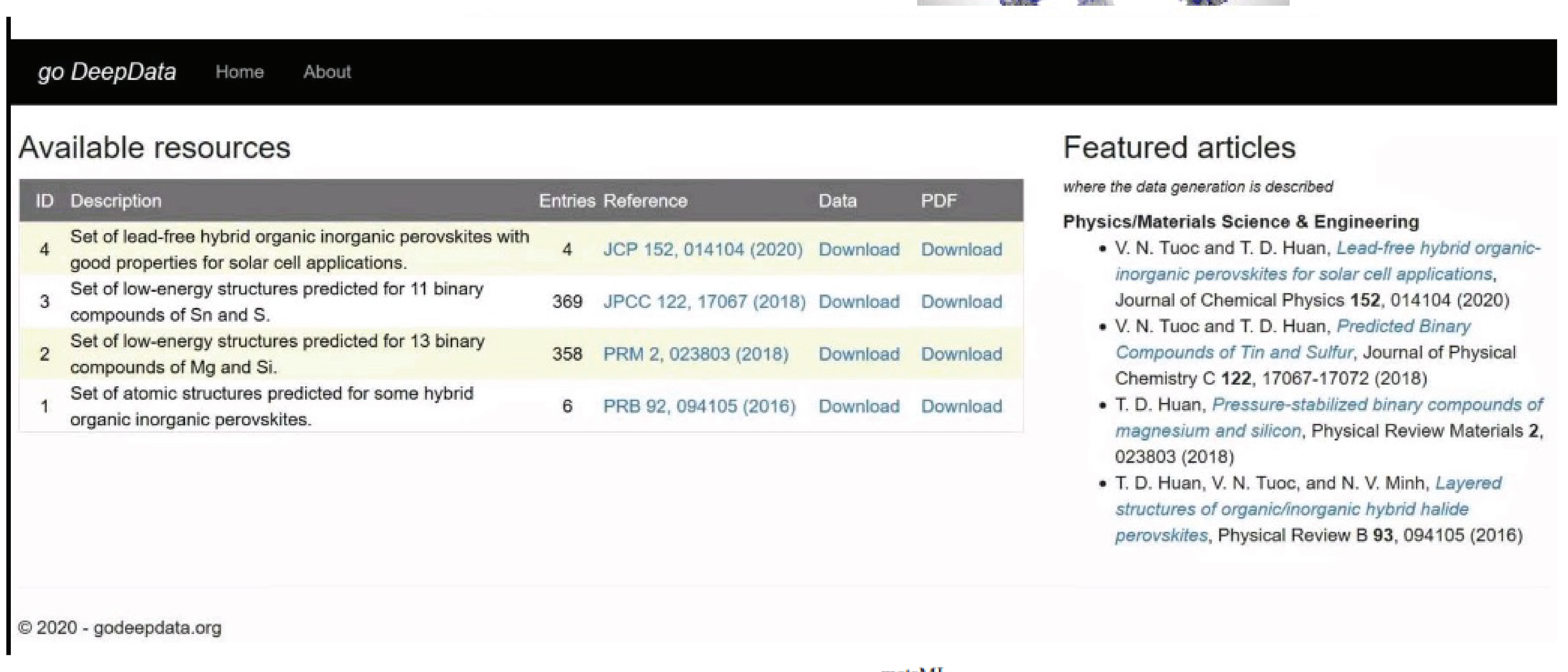


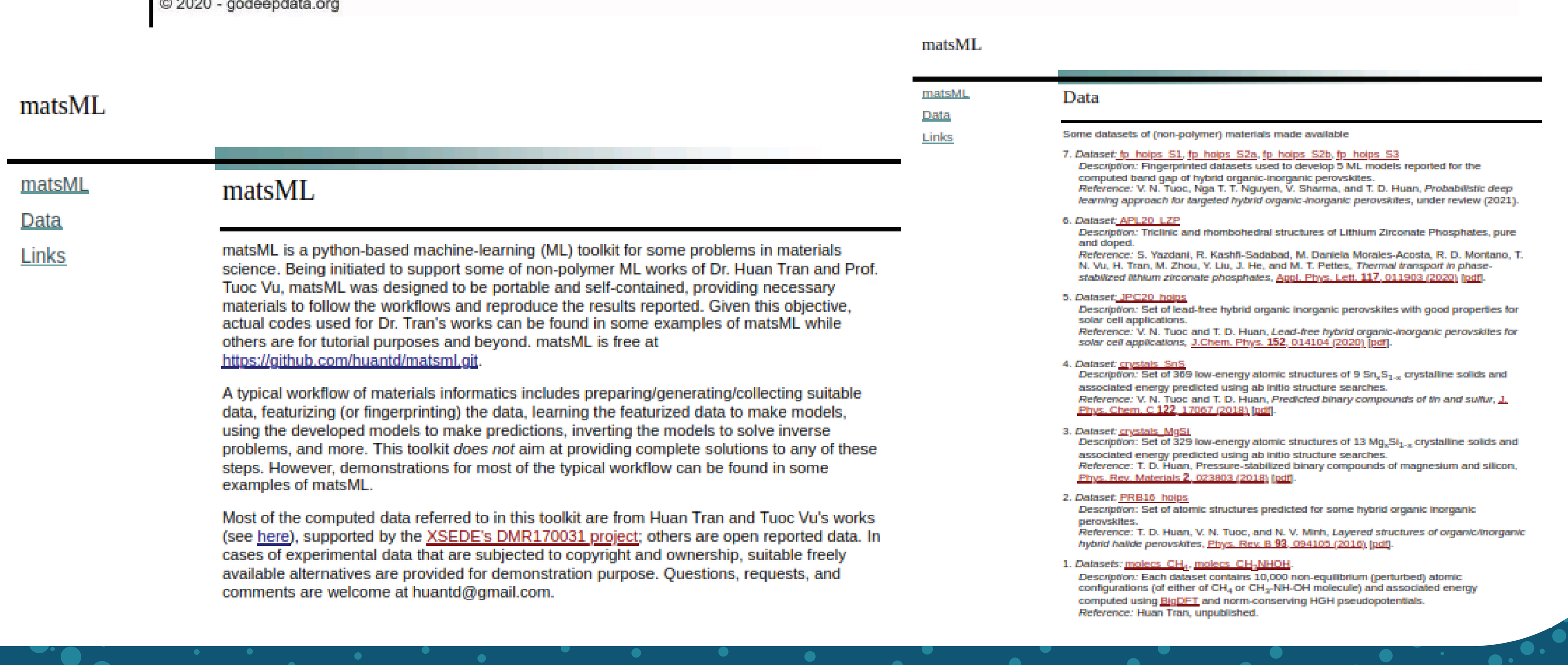
Three lines of activities, including (1) materials discovery by structure prediction methods, (2) data curation, taking inputs from line 1 and other sources, and (3) learning the obtained data for structure-properties relations and design rules











THÔNG TIN LIÊN HỆ

tuoc.vungoc@hust.edu.vn