

凝聚态物理前沿论坛第四十三讲

报告题目： CALYPSO材料结构预测方法与应用

报告人： 马琰铭（吉林大学 教授）

报告时间： 2015年12月4日（周五） 上午9:30

报告地点： 中科院固体所大楼221会议室

报告内容简介：

材料内部的原子堆垛方式，即结构，是深入理解材料物理和化学性质的关键信息。基于对称性的分类检索思想，结合基于粒子群多目标优化算法的群智理论，引入结构表征的成键特征矩阵，我们提出并发展了CALYPSO材料结构预测理论方法，在此基础上编制了自主知识产权的结构预测软件。只需输入材料的化学组分和外界条件（如压力），就可以合理确定材料的结构，并可以根据功能导向进行功能材料（如超硬和光学材料等）的结构设计。目前，利用CALYPSO可以开展三维晶体材料、二维层状材料、二维表面重构和零维纳米团簇的结构设计。

CALYPSO方法和软件学术研究使用免费，现已经被49个国家和地区1140余位研究人员采用开展科学研究，在*Nat. Chem.*, *Nat. Commun.*, *PRL*, *PNAS*, *JACS*等SCI刊物发表了220余篇文章。本次报告介绍CALYPSO方法的原理及其近期的几个应用，重点介绍超高压下H₂S的高温超导电性和地核压力和温度条件下氩气和铁的化学反应。

报告人简介：

马琰铭，2001年毕业于吉林大学获理学博士学位，先后到加拿大科学院、瑞士苏黎世高等工学院、日本理化所、香港大学开展学术研究。目前为吉林大学唐敖庆特聘教授，博士生导师，教育部“长江学者”特聘教授，中青年科技创新领军人才，获国家杰出青年基金、中国青年科技奖、国务院政府特殊津贴、国际高压科学与技术协会两年授予一人的“Jamieson Award”，以第一完成人获国家自然科学基金二等奖和教育部高等学校自然科学一等奖。从事凝聚态物质的结构与性质研究，发现金属钠在高压下转变为透明绝缘体，突破了固体高压金属化的传统认识和规律，研究成果入选2009年中国基础研究十大新闻和2010年国家“十一五”重大科技成就展；提出并发展了CALYPSO材料结构预测方法和软件，被49个国家和地区的1100余位同行采用开展学术研究。在美国三月会议、美国Gordon Conference、国际高压会议、欧洲和亚洲高压会议等国际学术会议做邀请报告30余次，在*Nature*, *Nature*子刊, *PRL*, *PNAS*等期刊发表了200余篇论文。