



## Seminar

# 基于群体智能的CALYPSO结构预测方法和应用

## 马琰铭教授

吉林大学物理学院



**Time: 4:00m, April. 20, 2018 (Friday)**

**时间: 2018年4月20日 (周五) 下午 4:00**

**Venue: Room W563, Physics Building, Peking University**

**地点: 北京大学物理楼 西563**

### Abstract

凝聚态物质内部的原子堆积方式，即原子结构，是深入理解凝聚态物质物理和化学性质的关键。发展仅依据化学组分即可确定原子结构的理论结构预测方法是物理、化学、材料等多学科领域的长期期盼，但却是一个挑战。

基于结构对称性的分类检索思想，结合群体智能的结构演化方法，引入结构表征的成键特征矩阵，提出并发展了卡里普索（CALYPSO）结构预测方法[1]，编制了自主知识产权CALYPSO软件（见网址：<http://www.calypso.cn>），仅需要化学组分和外界条件（如压强），即可预测和设计三维晶体[1]、二维层状材料[2]及其表面原子吸附[3]、二维表面重构[4]和纳米团簇[5]等的基态结构，并可以根据功能性质开展功能材料（如超硬和电子材料等）的逆向结构设计[6]。

截止目前，CALYPSO方法和软件被56个国家和地区的2000余位研究人员采用，用户在Nature子刊、PRL、PNAS等刊物发表了540余篇文章。本次报告简要介绍CALYPSO结构预测方法的基本原理，并介绍CALYPSO方法的若干最新进展和应用[7, 8]。

#### 参考文献

- [1] Wang et al., Phys. Rev. B 82, 094116 (2010); Compt. Phys. Commun. 183, 2063 (2012)
- [2] Wang et al., J. Chem. Phys. 137, 224108 (2012)
- [3] Gao et al., J. Phys. Chem. C 119, 20111 (2015)
- [4] Lu et al., Nature Commun. 5, 3666 (2014)
- [5] Lv et al., J. Chem. Phys. 137, 084104 (2012)
- [6] Zhang et al., J. Chem. Phys. 138, 114101 (2013); Zhang et al., Phys. Rev. X 7, 11017 (2017)
- [7] Zhong et al., Phys. Rev. Lett. 116, 057002 (2016)
- [8] Peng et al., Phys. Rev. Lett. 119, 107001 (2017)

### About the Speaker

马琰铭教授，吉林大学物理学院院长，教育部“长江学者”特聘教授，国家杰出青年基金获得者。2001年在吉林大学获得博士学位，先后到加拿大科学院和瑞士苏黎世高工开展博士后研究工作。长期从事高压物理的研究工作，在高压相结构与物性领域取得系列创新性成果，在Nature、Nature子刊、PRL等期刊发表了200余篇论文，SCI引用10,000余次，入选2017年科睿唯安全球“高被引科学家”物理榜单，获得2015年国家自然科学二等奖（第一完成人），获国际高压科学与技术协会授予的“Jamieson”奖和意大利国际理论物理中心颁发的“Walter Kohn”奖，在美国物理和化学学会的三月会议、美国Gordon会议、国际高压会议等国际学术会议做邀请报告60余次。