# 物质计算科学研究室（二室）

2017-5-24

# 内容

- 计算科学与研究室简介
- 人员队伍 与 研究平台
- 近期研究成果及影响力

计算机可以做什么？

互联网服务

工程 / 工业

电信

能源

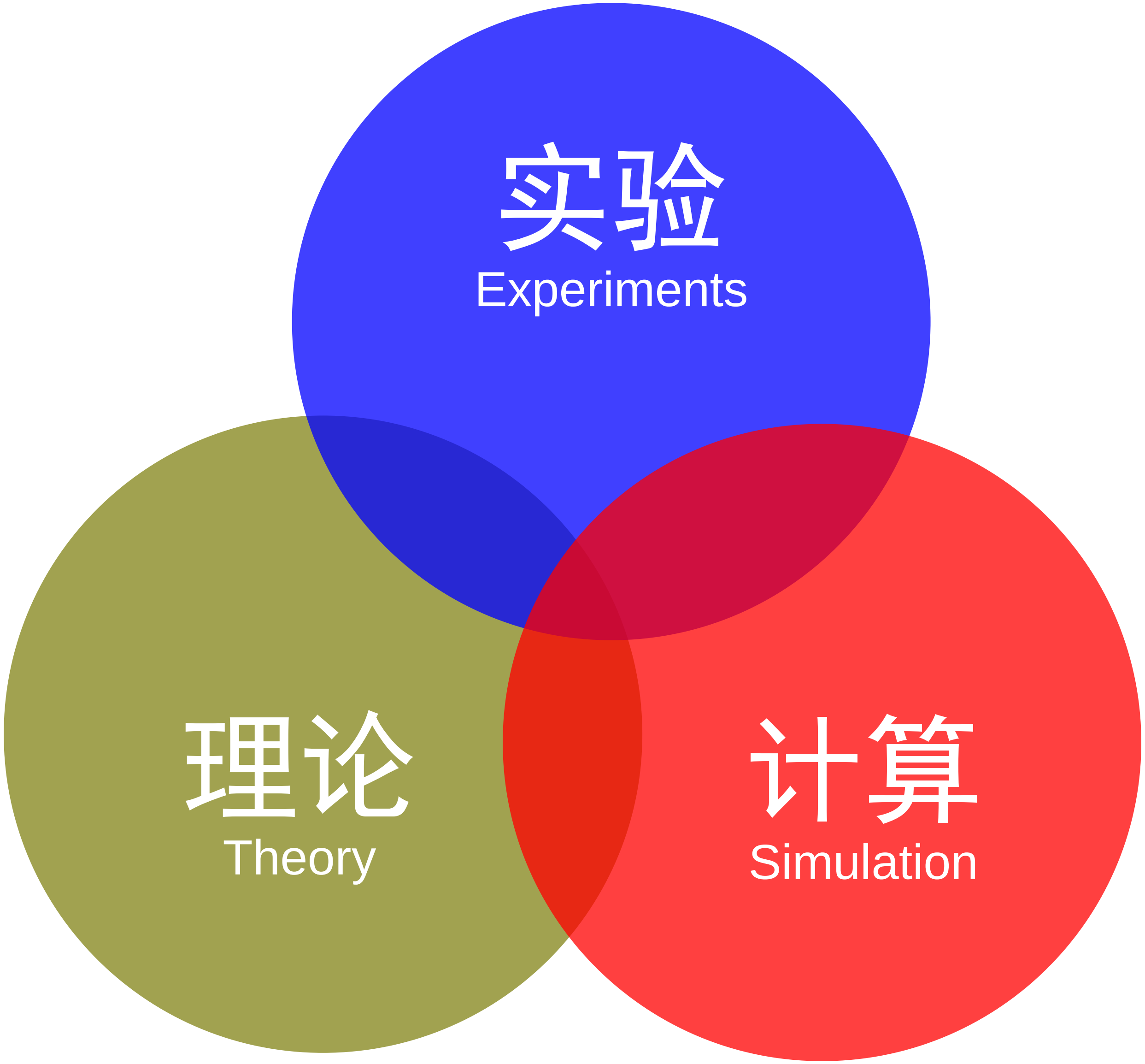
气象气候

教育和科研

游戏

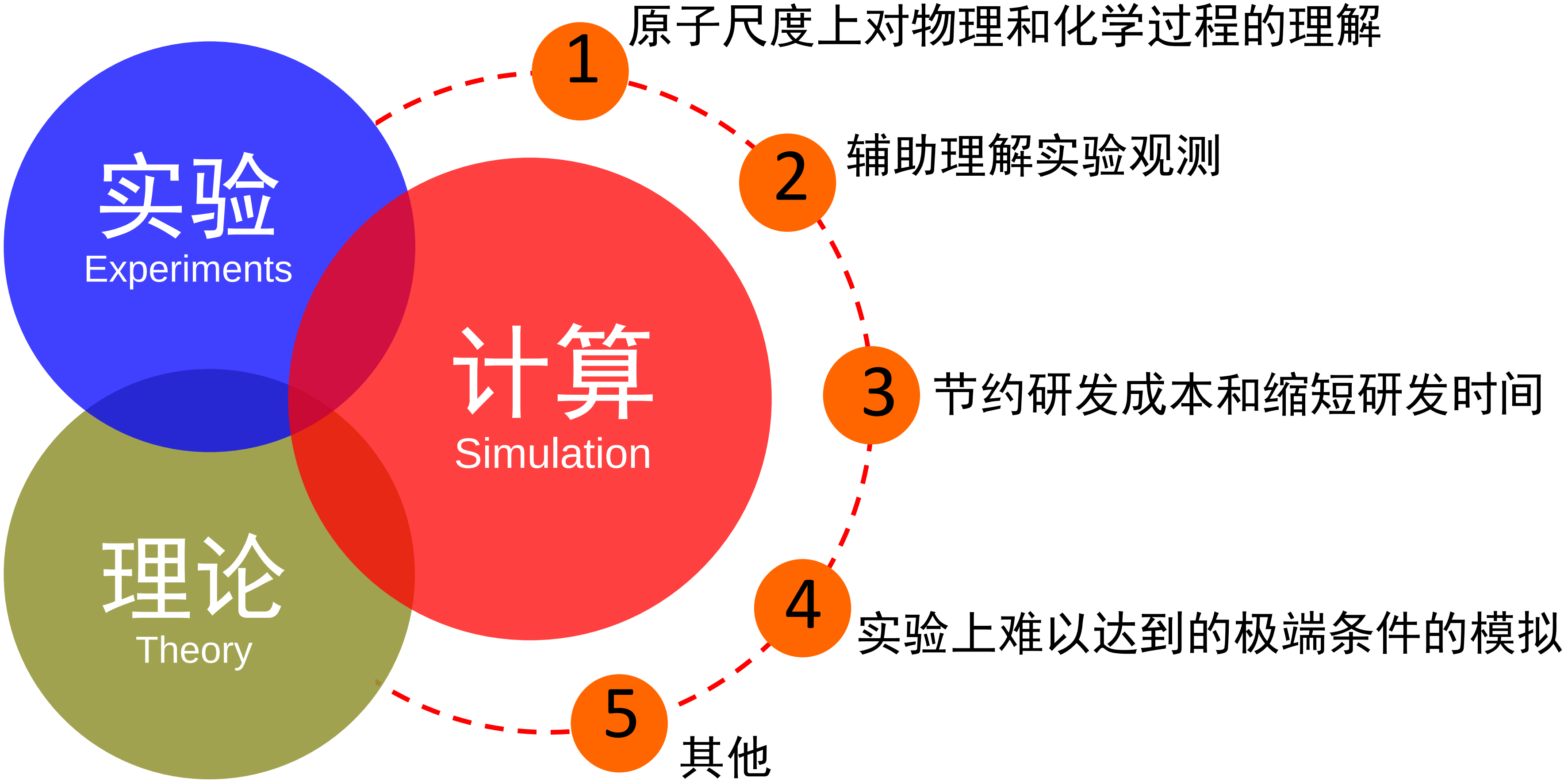
.........

现代科学研究的三大手段：实验、理论、计算



计算机辅助的材料设计被誉为“计算机里的实验室”

- 模拟方法的发展：诺贝尔化学奖（1998、2013）



# 计算科学与研究室简介



物质计算科学研究室创建于1982年，在物质计算科学研究方向上已有30多年的积累，国内最早开始物质计算科学的研究组之一。以揭示新型功能材料结构和物性为研究目标，发展高精度电子、原子以及介微观尺度的理论计算方法和计算程序。

- 新能源和辐照（核）材料
- 强关联磁性和轨道物理
- 纳米和介观体系的量子输运
- 材料基因工程
- 高压下材料的结构和物性
- 新型超导材料物性

# 人员队伍与研究平台



研究员（7）副研究员（7）均具有多年的海外留学经历

曾雉

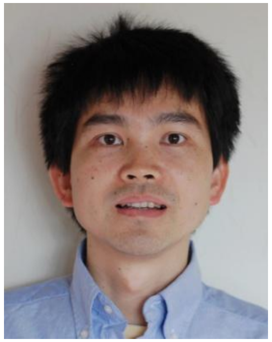
邹良剑

徐文

郑小宏

张永胜

王贤龙


杨勇

李永钢

刘大勇

范巍

郝华

雷华平

全亚民

贾婷

博士生导师：曾雉、邹良剑、徐文、郑小宏、张永胜（青千）、王贤龙（百人）

硕士生导师：杨勇、李永钢、刘大勇

# 人员队伍与研究平台



师资：研究员（7）副研究员（7）助理研究员（4）

师资：博(6)硕(3)导 百人计划(1)青千(1)

博导：曾雉、邹良剑、徐文、郑小宏、张永胜、王贤龙；硕导：杨勇，李永钢、刘大勇

交流：美国、加拿大、法国、日本…

经费：973项目、国家自然基金（重点）…

成果：年均在国际期刊上发表论文～30篇

**雄厚的师资、充足的经费、广泛的国际合作、高水平的成果产出**

## 软件及方法：

基于密度泛函理论的第一性原理方法：VASP, PWSCF, Win2K, SIESTA, ATK…

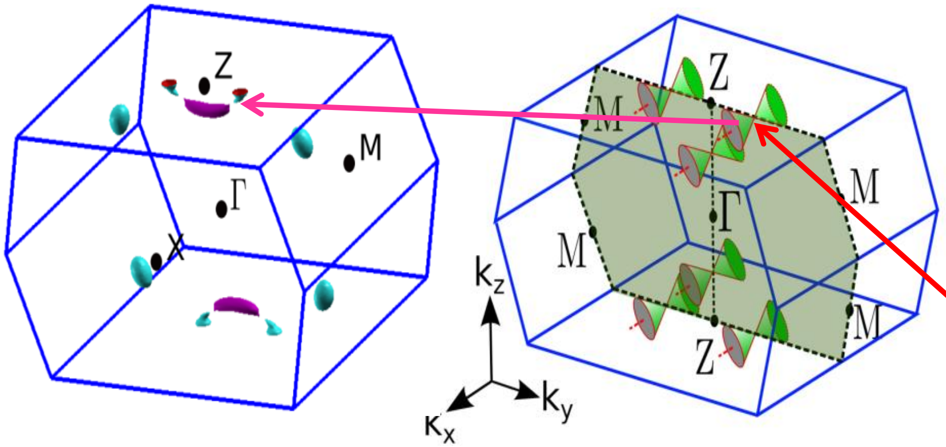
分子动力学方法：长时间分子动力学方法，推广模拟退火方法等

蒙特卡洛方法：QMC, EKMC…　　自主开发软件：IM3D…

## 硬件：

中国科学院超级计算中心合肥分中心

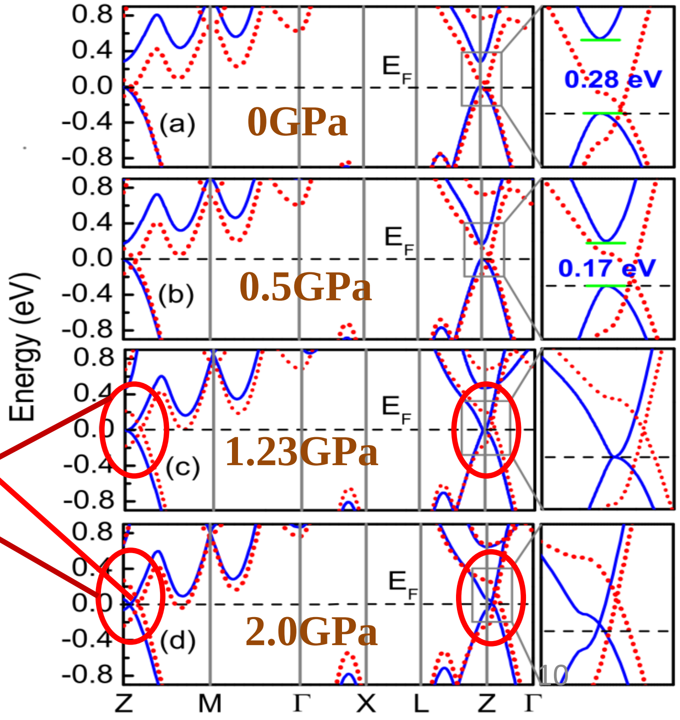
与实验合作，理论计算确定了高压下黑磷块体的晶体结构演化；发现临界压力下发生半导体-Dirac半金属相变，并揭示了压力可调的电子性质。




2.0 GPa下的费米面

4个Dirac锥

Dirac半金属




**Phys. Rev. Lett.** 115, 186403 (2015)

固体所物质计算科学研究室•邹良剑研究组

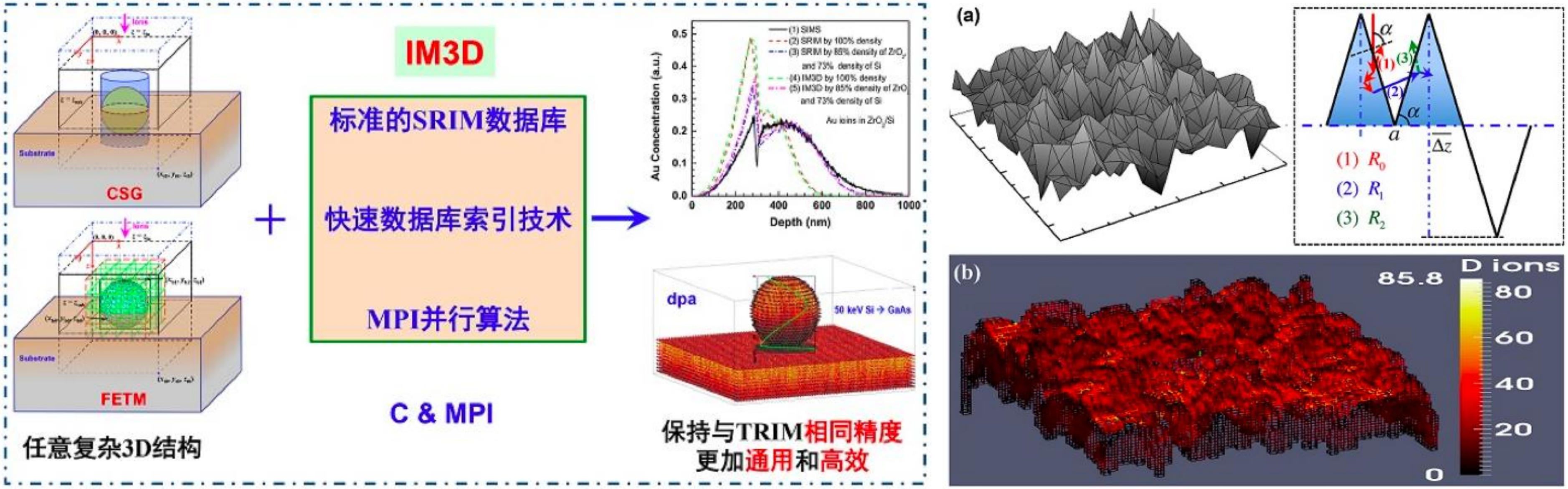
中国科学技术大学•陈先辉研究组

寻找三维Dirac半金属相的重要进展

- **IM3D：**核材料离子束辐照的三维MC并行软件（**开源**）

  http://theory.issp.ac.cn/IM3D

初级辐照损伤的快速模拟（对核材料进行预筛选）：
任意几何结构、任意组分材料内各种初级辐照缺陷的三维空间分布。




固体所物质计算科学研究室•曾雉研究组，中国科学技术大学•丁泽军研究组

美国麻省理工学院（MIT）•李巨研究组

Sci. Rep 5, 18130 (2015)

# 想想你的梦想