



An Efficient Structure Prediction Method and Computer Software



- State Key Laboratory of Superhard Materials
- International Center for Computational Method and Software
- College of Physics, Jilin University

Address: 2699 Qianjin Str., 130012, Changchun, China

第九届CALYPSO研讨会 (第二轮会议通知)

随着近年来第一性原理计算和材料结构预测方法的快速发展，只根据给定化学组分材料结构预测已经成为可能，并迅速成为国际热点，在三维晶体材料、二维层状材料、二维表面重构、零维团簇和功能材料的结构设计等方面取得了一批原始创新性成果。未来材料结构预测研究的创新式发展将有力推动我国物理，化学，材料，信息，地球，生物，工程等学科的发展，为我国国民经济的发展和国防建设做出贡献。

基于群体智能的CALYPSO材料结构预测方法和软件（详见<http://www.calypso.cn>），是我国自主创新发展的方法和软件，仅依据材料的化学组分即可开展材料微观原子结构的预测，已经广泛应用于晶体、表面（含二维单/多层材料）、界面、团簇、过渡态和界面的创新性设计，并能开展功能导向（如能隙，硬度和电子密度等等）的逆向材料设计。

CALYPSO软件学术使用免费，已经被73个国家和地区的3200位同行签订版权协议使用。截止目前，国内外同行使用本软件已经在Nat Chem、Nat Commun、Sci Adv、PRL、PNAS、JACS等SCI期刊发表了1300余篇SCI学术论文，解决了一系列与凝聚态物质结构密切相关的科学难题，设计了多种高温超导体、超硬材料和高效能量转换功能材料。

由吉林大学超硬材料国家重点实验室、吉林大学计算方法与软件国际中心和吉林大学物理学院联合主办，中国地质大学（武汉）数学与物理学院承办的第九届CALYPSO研讨会将于2021年10月16日-10月18日在中国美丽的江城—武汉召开。

本次线上研讨会包含两个专题：（1）物理、化学和材料等领域计算模拟前沿研讨专题；（2）CALYPSO软件上机学习专题。分别安排在每天上午与下午。

专题（1）多位国内顶尖计算领域的科学工作者聚焦国际计算前沿；CALYPSO主创成员将针对CALYPSO方法原理、软件功能、以及最新进展进行专题汇报。

专题（2）精心设计了CALYPSO计算实例演示与同步上机练习，目标是初学者在会议结束后能够独立使用CALYPSO开展研究。上机练习包括以下内容：CALYPSO在晶体、表面重构、界面、二维层状材料、团簇结构设计中的应用；功能导向的逆向材料设计，如超硬材料设计；固-固相变中过渡态结构搜索等等。

欢迎各位老师和同学通过海报形式交流最新研究成果。研讨会将评选最佳海报两名，并颁发证书和奖金。

为了更好的完成会议组织与协调工作，敬请各位参会人员于2021年10月11日前在CALYPSO网站注册（<http://www.calypso.cn/workshop>）。

报到时间：2021年10月15日。

报到地点：武汉光谷金盾大酒店一楼大厅（湖北省武汉市洪山区吴家湾特1号）

会议地点：武汉光谷金盾大酒店三楼报告厅

注册费：教师 1000元；学生700元。会议期间食宿自理。注册现场开具发票。

承办单位：中国地质大学（武汉）数学与物理学院

联系人：卢成 18062030572

邮箱：lucheng@cug.edu.cn

主办单位：吉林大学超硬材料国家重点实验室

吉林大学计算方法与软件国际中心

吉林大学物理学院

会议召集人：马琰铭

会议联系人：王建云 13463336655

李鹤飞 18643655424

会议邮箱：calypso@jlu.edu.cn