

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人：赵亚帆 副研究员

( 中物院高性能数值模拟软件中心 )

报告题目：

材料结构预测和无序固溶材料  
建模中的优化问题

邀请人：刘歆 副研究员

报告时间：2020 年 1 月 9 日（周四）

上午 11:00-12:00

报告地点：数学院南楼二层

202 教室

## 摘要:

材料结构的预测和建模是材料模拟中的两个关键问题。针对团簇、晶体结构的预测，我们开发了基于 **Basin Hopping** 算法的结构搜索方法，实现了根据材料的点群或者空间群生成高对称结构的算法，实现了结构调整、结构识别、结构演化和并发计算的技术，开发了团簇结构搜索程序 **TGMin** 和晶体结构搜索程序 **STEPMAX**。针对无序固溶材料的结构建模，我们提出了相似原子环境 (**similar atomic environment, SAE**) 理论，并以团簇展开方法为基础，发展了定量描述固溶材料无序度的算法，设计了优化问题的目标函数，开发了无序固溶材料结构建模程序 **SAE**。利用以上的方法，我们开展了团簇结构搜索、晶体结构搜索、无序固溶材料建模等研究，取得了很好的效果。

## 个人简介:

赵亚帆，2007年毕业于清华大学化学系，获理学学士学位；2013年毕业于清华大学化学系理论与计算化学专业，获理学博士学位；2014年加入中物院高性能数值模拟软件中心材料团队，工作至今；2017年获评副研究员。已发表学术论文 20 余篇。目前主要的工作内容是材料状态方程计算、结构建模的方法和程序的开发。

# 欢迎大家参加!