

第九届 CALYPSO 研讨会在武汉成功召开

2021年10月16日至18日，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”在武汉成功召开。中国地质大学（武汉）副校长刘勇胜教授为大会致欢迎辞，CALYPSO 创始人、吉林大学副校长马琰铭教授在开幕式上致辞，中国地质大学（武汉）数学与物理学院院长郭上江教授出席了开幕式。会议开幕式由中国地质大学（武汉）数学与物理学院副院长张保成教授主持。

会议邀请了来自加拿大萨斯喀彻温大学、韩国基础科学研究院多维碳材料中心、清华大学、北京大学、中国科学院上海硅酸盐研究所、吉林大学等单位的14位教授、10位国家杰出/优秀青年基金获得者等做了大会报告。150余位专家学者参加了本届研讨会，蔻享直播平台累计观看达12,000余人次。CALYPSO 主创人员还针对 CALYPSO 结构搜索与设计方法的原理进行了详细的介绍，上机实习包含利用 CALYPSO 开展三维晶体、表面重构、零维团簇等结构设计、过渡态搜索、功能导向的材料逆向设计（例如超硬材料等）、机器学习势加速 CALYPSO 结构预测以及 ATLAS 和 ARES 软件的使用等。此次会议不仅为 CALYPSO 软件用户提供了学习与交流的平台，也向参会专家学者示范了如何开展材料结构搜索与设计的前沿研究。



中国地质大学（武汉）数学与物理学院副院长张保成教授主持会议开幕式



中国地质大学（武汉）副校长刘勇胜教授致欢迎辞



吉林大学副校长马琰铭教授致开幕辞

CALYPSO 是吉林大学马琰铭研究组自主提出并发展的结构预测方法和同名软件。该方法可以仅根据物质的化学组分和外界条件（如压强）来搜索并确定物

质的原子结构，以及以具体性质为导向进行功能材料（如超硬材料、电子材料、光催化材料等）的结构设计。CALYPSO 结构预测方法及软件自 2006 年底开始研发，2010 年 10 月研发成功并发布了 1.0 版本，至今已经走过了十四个年头，并即将发布 7.0 版本。在开发团队的不懈努力下，CALYPSO 已经发展成为国际结构搜索领域最具影响力的方法和软件之一。截至 2021 年 10 月，CALYPSO 方法和软件已经被包括诺贝尔奖获得者团队在内的 73 个国家和地区 3400 余位用户使用，发表的 SCI 论文数量逐年攀升，在 Nat Chem、Nat Commun、PRL、PNAS、JACS、Nano lett 等国际顶尖期刊发表了 1300 余篇 SCI 论文。期盼 CALYPSO 方法和软件可以为促进我国材料结构搜索和设计领域的发展做出更多贡献。

第九届 CALYPSO 研讨会

中国·武汉 2021.10.16

