



复旦大学物理系 Colloquium

Time: 14:00, Tuesday, 2024.12.10

Location: C108, Jiangwan Physics Building

大数据驱动的量子材料计算设计

翁红明

中国科学院物理研究所

摘要: 材料计算设计一直是计算物理研究人员努力追求的目标。基于量子力学的第一性原理计算可以比较精准地给出固体材料的电子结构和物理性质，是进行量子材料计算研究和设计的主要工具。通常，人们在掌握了物理机理和物理图像后，根据已有的材料知识和经验，利用有效的计算工具，可以设计或找寻到具有目标性质的候选材料。随着“大数据+人工智能”技术与理念的快速发展和完善，量子材料计算设计根据数据量的多少或数据的使用方式，分为三个层次。在数据缺乏的时候，个人的物理图像、计算工具以及材料知识都非常重要，材料设计处于“大海捞针”阶段；当材料数据量多且可方便检索时，个人的材料知识可以被穷尽式的搜索替代，但物理图像和计算工具仍然需要；当材料的数据量较大且可以用于训练机器学习模型时，材料性质与多个复杂变量之间的相关关系、模式或规律可以被模型很好地学习到，而训练好的模型就是一个高效的计算工具，可直接用于新材料相关物性的计算设计。这极大地简化了对研究人员物理图像、计算工具和材料知识的要求，提升了研发效率。本报告将通过介绍若干拓扑材料的计算设计经历，来展示数据驱动的材料设计的特点、方式和优势，推动“大数据+人工智能”研究新范式的建立与发展。



报告人简介: 翁红明，中科院物理所研究员，中科院凝聚态物质科学数据中心主任。2000年获得南京大学物理系本科学位，2005年获得南京大学凝聚态物理博士学位。主要从事计算凝聚态物理方向的研究工作，一方面致力于计算方法和程序的开发，另一方面着重于凝聚态物质中新奇量子现象的计算研究。迄今共发表SCI论文250余篇，被引用29000余次，h-因子67。先后获得基金委“优青”、“杰青”项目资助，还获得中国科学院青年科学家奖，腾讯基金会科学探索奖，陈嘉庚科学奖（排名第三）和国家自然科学一等奖（排名第三）等。2018年起连续7年入选科睿唯安“全球高被引科学家”。其“理论预言并实验发现外尔半金属”的相关工作入选英国物理学会“物理世界2015年度十大突破”，入选美国物理学会“物理2015年度八大亮点工作”，科技部“2015年度中国十大科技进展”等。2018年该工作入选美国物理学会“Physica Review”系列期刊125周年纪念论文集。

邀请人：向红军