



## Weekly Seminar

atomly.net 材料科学数据库

### 刘淼

中国科学院物理研究所



**Time: 4:00pm, Dec. 9, 2020 (Wednesday)**

**时间: 2020年12月9日 (周三) 下午4:00**

**Venue: Room W563, Physics building, Peking University**

**地点: 北京大学物理楼, 西563会议室**

### Abstract

材料是人类社会的物质基础，实现材料的按需设计是一直以来人类的终极梦想。借助以量子力学为基础的第一性原理计算方法，人们打开了在短时间内精确预言无机晶体材料的性质的大门。借助高性能计算和数据信息化技术的发展，中科院物理研究所将材料计算科学推进到了高通量计算和大数据时代。本次报告将呈现，物理所近期在材料数据库领域的进展，讲述我们如何建设一套源自物理所的无机晶体材料计算数据库: atomly.net。atomly数据库包含了17万+个无机晶体材料的第一性原理计算结果（包含电子结构信息: DOS + energy bands），数据的数量和质量已经和其他世界知名数据库比肩。

### About the speaker

刘淼，中科院物理所特聘研究员，博士生导师。atomly.net主创。

2004年本科毕业于中国科学技术大学物理系，2004-2007年先后于中国科学技术大学物理系和犹他大学物理系读研，2012年于犹他大学材料科学与工程系获博士学位，2013-2018年在劳伦斯伯克利国家实验室从事博士后研究，2018年加入中科院物理所，专注于材料数据库开发和基于数据的材料研发。