

编者按

近年来,随着第一性原理计算和材料结构预测方法的发展,只根据给定化学组分的材料结构设计和预测成为可能,并迅速成为科学研究的热点,呈现出了激动人心的发展趋势。目前,材料结构预测研究已经在三维晶体材料、二维层状材料、二维表面重构和零维团簇的结构设计等方面取得了一大批原始创新性成果。未来,材料结构预测方法会更加广泛地应用于结构现象丰富的研究领域,有力推动我国物理、化学、材料、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。

CALYPSO 结构预测方法和软件由我国自主发展(<http://www.calypso.cn>),学术使用免费,目前被 40 多个国家和地区的近千位同行采用开展科学研究,国内外同行使用 CALYPSO 方法和软件已经在 *Nat Chem*, *Nat Commun*, *PRL*, *PNAS*, *JACS*, *Nano Lett* 等权威 SCI 期刊发表学术论文 170 余篇,解决了若干长期无法解决的科学难题。例如:设计了固体 H_2S 在高压下的金属相结构,在此基础上预言了金属化 H_2S 是潜在的高温超导体,引领了后续凝聚态物理领域的重大实验发现——超高压下 H_2S 的 200 K 超导电性。CALYPSO 结构预测方法和软件已经成为国际主流的结构预测方法和软件之一。

为了促进我国科学家快速、全面地了解和把握国际结构预测研究领域的最新进展,《科学通报》组织了“CALYPSO 结构预测方法及应用”专题,邀请国内结构预测研究领域的专家撰文介绍 CALYPSO 结构预测方法的最新进展和应用。本期专题包括 5 篇文章,其中有详细介绍 CALYPSO 结构预测方法和软件的综述性文章^[1],还有应用 CALYPSO 方法开展的几个典型示范性研究工作,包括硅的新型金属亚稳相的结构设计^[2]、新型二维层状材料的结构设计^[3]以及新型功能材料(如超硬材料^[4]、高能密度材料^[5])的结构设计等。

上述文章从方法和应用两个角度介绍了 CALYPSO 的一些最新进展,一定程度上展示了过去几年我国在结构预测研究领域取得的重要成果。以材料设计为核心的材料基因组计划是目前备受关注的重大材料发展研究战略,相信随着 CALYPSO 材料结构预测方法的不断发展和完善,CALYPSO 势必会在材料基因组的研究中发挥着不可替代的作用。我们希望本期专题的出版,可以加强我国材料结构预测研究同行之间的学术交流,促进我国在材料结构预测研究上的整体提高。

- 1 Wang Y C, Lü J, Ma Y M. CALYPSO structure prediction method (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2015, 60: 2580–2587 [王彦超, 吕健, 马琰铭. CALYPSO 结构预测方法. *科学通报*, 2015, 60: 2580–2587]
- 2 Wang Q Q, Luo K, Ma M D, et al. A new metastable metallic silicon allotrope (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2015, 60: 2588–2600 [王倩倩, 罗坤, 马梦东, 等. 硅的新型亚稳金属同素异形体. *科学通报*, 2015, 60: 2588–2600]
- 3 Zhuo Z W, Wu X J. Structural exploration of two-dimensional materials (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2015, 60: 2601–2607 [卓之问, 武晓君. 二维单层材料的结构搜索. *科学通报*, 2015, 60: 2601–2607]
- 4 Wang Y X. Predicting new superhard materials by CALYPSO (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2015, 60: 2608–2615 [王渊旭. 结构搜索程序 CALYPSO 在新型超硬材料探索方面的应用. *科学通报*, 2015, 60: 2608–2615]
- 5 Wang X L, Li J F, Chen L. The design of new high energy density materials based on CALYPSO methods (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2015, 60: 2616–2620 [王晓丽, 李建福, 陈丽. 基于 CALYPSO 方法的新型高能量密度材料设计. *科学通报*, 2015, 60: 2616–2620]

马琰铭

吉林大学超硬材料国家重点实验室, 长春 130012