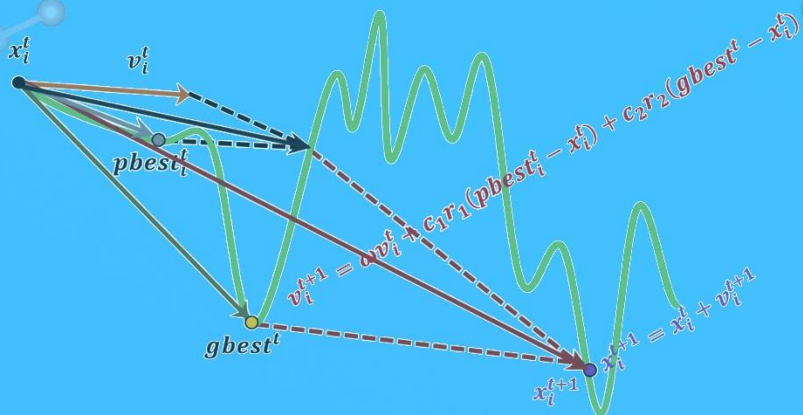


CALYPSO

结构预测方法及软件



联系人：马琰铭

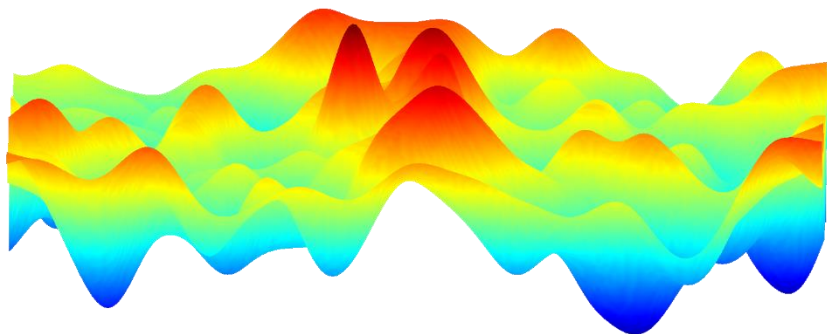
单位：吉林大学

邮箱：mym@calypso.cn

网址：http://mym.calypso.cn

前言

凝聚态物质内部的原子堆垛方式，即物质的原子结构，是深入理解物质的物理与化学性质的关键信息，也是开展功能材料设计的基础。发展只依据物质的化学组分（或化学配比）来确定物质结构的理论方法是物理、化学和材料等研究领域的长期难题。关键难点在于物质势能面的高度复杂性，例如，对于一个单胞内含有10个原子的周期性体系，其复杂势能面对应的结构数目可能达到 10^{11} 个，而且随着单胞内原子数目的增加，结构数目会成级数的增加。理论结构预测就是在如此庞大的结构群里面找到能量最低的唯一结构，具有巨大挑战性。1988年《自然》杂志社主编 John Maddox 在《自然》期刊上发表社论说：“物理学的重要挑战之一是只依据物质化学组分来确定物质的原子结构”。



简介

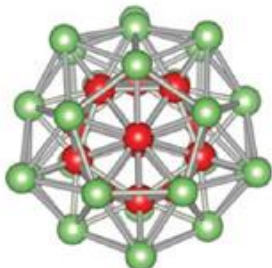
CALYPSO (Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization) 是吉林大学马琰铭研究组提出并发展的结构搜索方法和同名软件。该方法可以仅根据物质的化学组分和外界条件（如压强）来搜索或确定物质的原子结构，并可以根据功能需求进行功能材料（如超硬材料等）的结构设计。截至2017年10月，**CALYPSO**方法和软件已经被包括诺贝尔奖获得者在内的**56**个国家和地区**1800**多位用户使用，在**Nat Chem**、**Nat Commun**、**PRL**、**PNAS**、**JACS**、**NanoLett**等国际顶尖期刊发表了**450**余篇**SCI**论文，成为国际结构搜索领域最具影响力的方法和软件之一。

软件授权

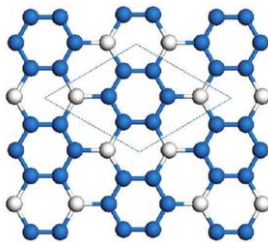
CALYPSO软件包由吉林大学马琰铭研究组开发，著作权登记号：**2010SR028200**。目前已经推出**CALYPSO 6.0**版本，本软件对于学术使用免费，仅需签订一对一使用协议。详情请参阅本软件官方网站 <http://www.calypso.cn>

主要功能

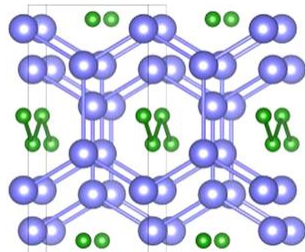
- ◆ 根据化学组分和外界条件搜索不同维度的物质结构
 - 零维团簇或分子结构
 - 二维层状、表面重构及吸附结构
 - 三维晶体结构
- ◆ 设计具有特殊性质的功能材料，例如，超硬材料、电子材料、光催化材料等
- ◆ 条件约束的结构搜索，如固定晶格参数，原子位置，空间群，或分子单元的结构搜索
- ◆ 变化学组分的结构搜索，如寻找最稳定的化学配比
- ◆ 固-固相变的过渡态搜索
- ◆ 蛋白质结构预测



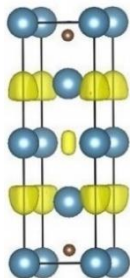
零维团簇结构



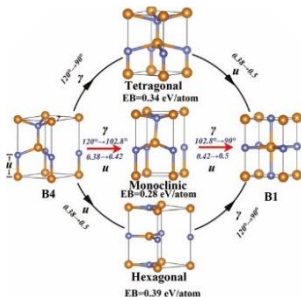
二维层状结构



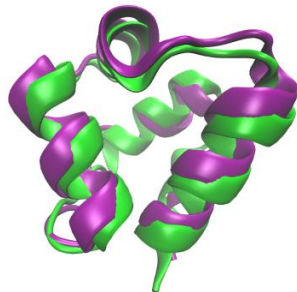
三维晶体结构



电子化合物结构



过渡态结构搜索



蛋白质结构

◆ 三维晶体结构预测

- Crystal Structure Prediction via Particle Swarm Optimization.
Phys. Rev. B. 82, 094116 (2010).
- CALYPSO: A Method for Crystal Structure Prediction.
Comput. Phys. Commun. 183, 2063 (2012).

◆ 零维团簇结构预测

- Particle-Swarm Structure Prediction on Clusters.
J. Chem. Phys. 137, 084104 (2012).

◆ 二维层状结构预测

- Predicting Two-Dimensional Boron-Carbon Compounds by the Global Optimization Method.
J. Am. Chem. Soc. 133, 16285 (2011)
- An Effective Structure Prediction Method for Layered Materials Based on 2D Particle Swarm Optimization Algorithm.
J. Chem. Phys. 137, 224108 (2012)

◆ 二维表面结构预测

- Self-assembled Ultrathin Nanotubes on Diamond(100) surface.
Nat. Commun. 5, 366 (2014)

◆ 二维吸附结构预测

- Structure Prediction of Atoms Adsorbed on Two-Dimensional Layer Materials: Method and Applications.
J. Phys. Chem. C 119, 20111 (2015)

◆ 功能材料的结构设计

- First-principles Structural Design of Superhard Materials.
J. Chem. Phys. 138, 114101 (2013)
- Computer-Assisted Inverse Design of Inorganic Electrides.
Phys. Rev. X 7, 011017 (2017)

◆ XRD逆向结构搜索

- X-ray diffraction data-assisted structure searches.
Comput. Phys. Commun. 213, 40 (2016)

◆ 蛋白质结构预测

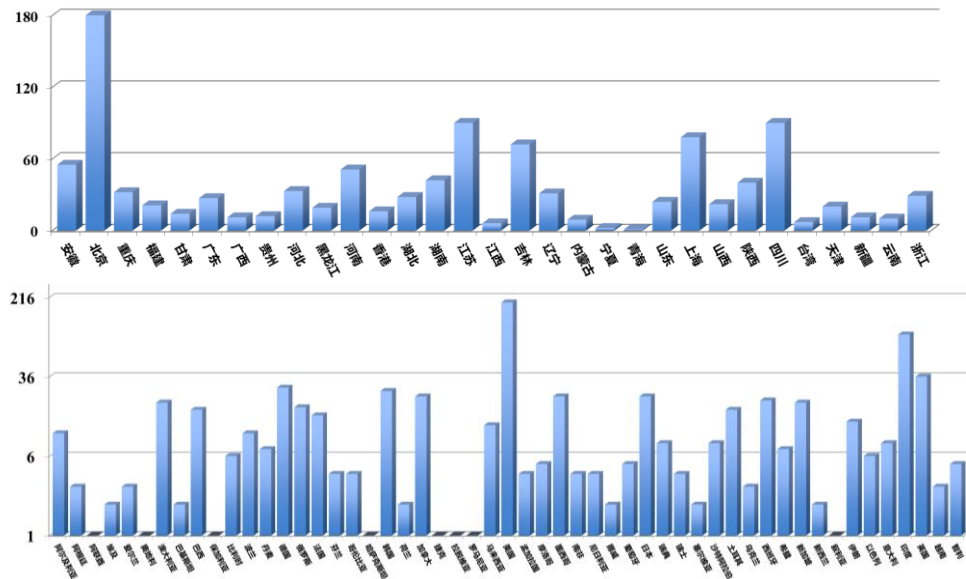
- A database assisted protein structure prediction method via a swarm intelligence algorithm. *RSC Adv. 7, 39869 (2017)*

◆ 晶体结构原型数据库构建

- Construction of crystal structure prototype database: methods and applications.
J. Phys-Condens. Matter (2017)

用户情况

截至2017年10月，CALYPSO国内注册用户**1100**余人，涵盖了**31**个省份和地区的主要高校和科研院所。国外注册用户**740**人，分布于**55**个国家和地区。



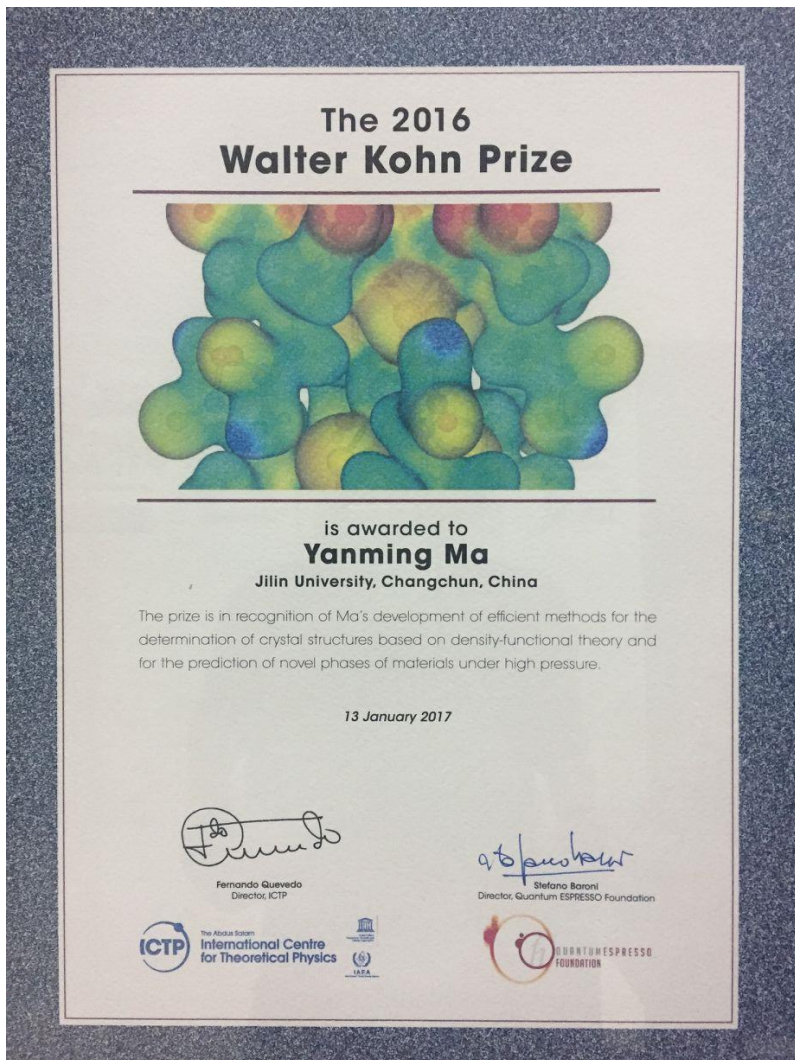
姓名	单位	利用CALYPSO开展的代表性工作
Roald Hoffmann (诺贝尔化学奖得主)	美国康奈尔大学	预测了具有不同维度电子化合物 Li_4N 奇异新结构[JACS 138, 14108 (2016)]
Neil W. Ashcroft (美国科学院院士)	美国康奈尔大学	提出 Si_3C 、 SiC_3 等Si-C体系新相结构,丰富Si-C相图 [JACS 135, 11651 (2013)]
Ho-kwang Mao (美国科学院院士)	美国卡内基研究院	设计了兼具超硬和超导特性 BeB_6 结构[JPCL 7, 4849 (2016)]
John S. Tse (加拿大科学院院士)	加拿大萨省大学	预测了 CO_2 的高压相结构 [PNAS 113, 11110 (2016)]
Russell J. Hemley (美国科学院院士)	美国卡内基研究院	预测CH化合物的高压相结构[JPCL 7, 4218 (2016)]
Jonathan I. Lunine (美国科学院院士)	美国康奈尔大学	预言了HCN聚合物的结构[PNAS 113, 8121(2016)]
Boris Yakobson (h-index: 56, 论文被引次数: 22296)	美国莱斯大学	预测了硼在金属沉底上的稳定结构[Angew. Chem. Int. Edit. 127, 13214 (2015)]
David J. Singh (h-index: 80, 论文被引次数: 55084)	美国密苏里大学	确定了实验上发现的 Mg_2Pb 新相结构[AIP Adv. 6, 125108 (2016)]
Alexander I. Boldyrev (h-index: 66, 论文被引次数: 13783)	美国犹他州立大学	预言包含平面六配位铜的 Cu_2Si 新奇二维材料[JACS 137, 2757 (2015)]

国际影响

- 2017年6月6日，芬兰**IMPRESS**研讨会，作为大会邀请报告人之一介绍了**CALYPSO**方法和应用。
- 2017年3月13-17日，美国新奥尔良**ACS**三月会议，在专题“**Novel Chemistry under Conditions**”受邀请介绍了**CALYPSO**方法
- 2017年1月13日，作为首位**Walter Kohn**奖得主，在意大利国际理论物理中心做大会报告介绍**CALYPSO**方法。
- 2016年7月17-22日，美国**Gordon Research Conference at High Pressure**会议，大会开设高压专题“**Chemistry under pressure**”，作为四位大会邀请报告人之一介绍了**CALYPSO**在高压化学研究中的应用
- 2016年3月13-17日，美国圣地亚哥第**251**届**ACS**三月会议，在专题“**Computational Materials Chemistry**”受邀请介绍了**CALYPSO**方法
- 2015年9月，西班牙马德里“**第25届国际高压科学与技术研讨会**”，作为**Keynote Speaker**报告了**CALYPSO**方法在高压相结构预测方面的应用
- 2014年9月7-12日，法国里昂“**欧洲高压科学会议**”，4位大会邀请报告之一，介绍了**CALYPSO**方法
- 2014年3月3-7日，美国丹弗**APS**三月会议，专题：“**Computational discovery and design of novel materials**”，3位邀请报告之一介绍了**CALYPSO**方法
- 2012年6月24-29日美国**Gordon Research Conference at High Pressure**会议，在高压结构预测专题“**Structural Predictions at Extreme Conditions: Are Experiments Still Necessary?**”，作为2位大会邀请报告人之一介绍了**CALYPSO**方法

获得奖励

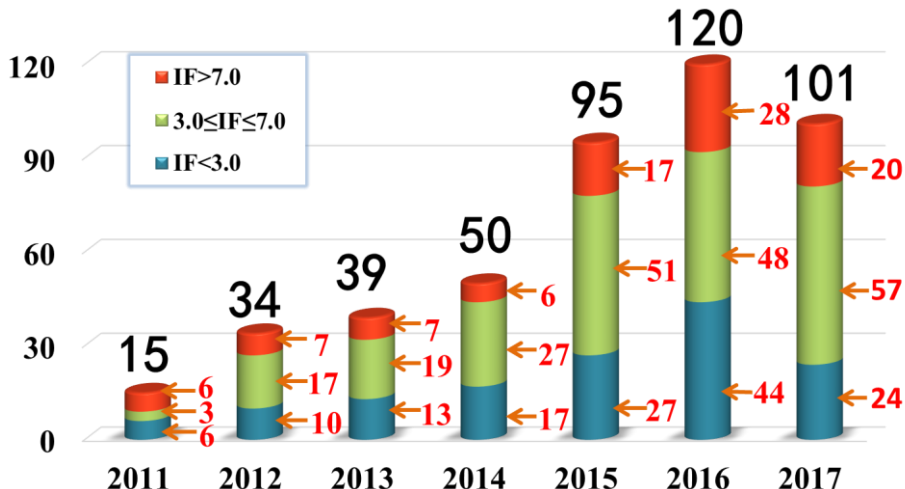
2017年，因发展CALYPSO方法和软件包并无偿提供给科研工作者使用，意大利国际理论物理中心(International Centre for Theoretical Physics)和Quantum ESPRESSO基金会将**首届沃尔特-科恩 (Walter Kohn)** 奖授予吉林大学马琰铭教授。



发表文章

截至2017年10月，国内外用户通过CALYPSO方法和软件在Nat Chem、Nat Commun、PRL、PNAS、JACS、NanoLett等国际顶尖期刊发表了450余篇SCI论文。

IF < 3.0: 141篇 3.0 ≤ IF ≤ 7.0: 222篇 IF > 7.0: 91篇

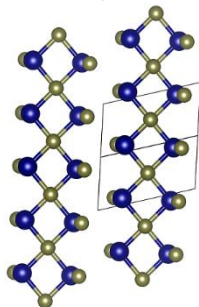


期刊	发表文章数
<i>Nature Chem.</i>	2
<i>Nature Commun.</i>	4
<i>Phys. Rev. Lett.</i>	16
<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	16
<i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i>	7
<i>Nano Lett.</i>	5
<i>Angew. Chem. Int. Edit.</i>	4

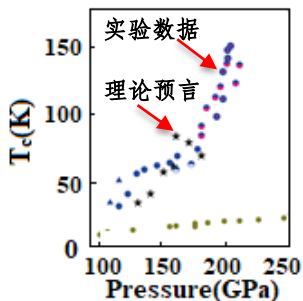
成功范例

CALYPSO方法和软件已广泛应用于物理、化学和材料等学科领域，解决了若干长期无法解决的科学难题，获得了大量原创性研究成果。

- ◆ 寻找超导温度超过40K的传统BCS高温超导体是科学家们一直的梦想，但却长期没有突破。利用CALYPSO预言了H₂S的高压金属相，排除了其分解为单质硫和单质氢的可能性，并预言H₂S金属相在160万大气压具有高超导转变温度~80K [参见 *J. Chem. Phys.* 104, 174712 (2014)]。本工作是硫-氢化合物高压超导的最原始文献，在本工作的引领与启发下，德国Drozdov等人的高压实验突破性的发现了H₂S的高温超导特性，其超导温度在155万大气压下达达到203K。[参见 *Nature* 525, 73 (2015)]

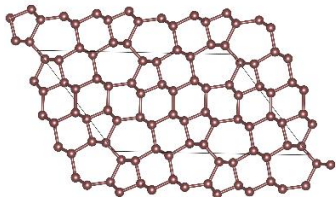


H₂S 高压金属相P-1结构

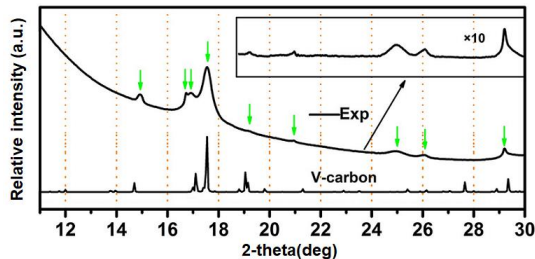


实验超导温度随压力变化图

- ◆ 寻找具有优异性能的碳材料一直是材料研究领域的热点问题。早期在冷压石墨研究中发现了具有超硬特性的新型碳材料，然而其结构长期无法确定。利用CALYPSO结构预测方法结合X射线衍射实验，成功确定了新型全sp³碳相(命名为V carbon)，其硬度可与金刚石相媲美。[参见 *Phys. Rev. Lett.* 118, 245701 (2017)]

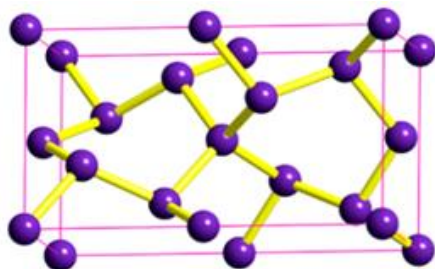


V carbon结构



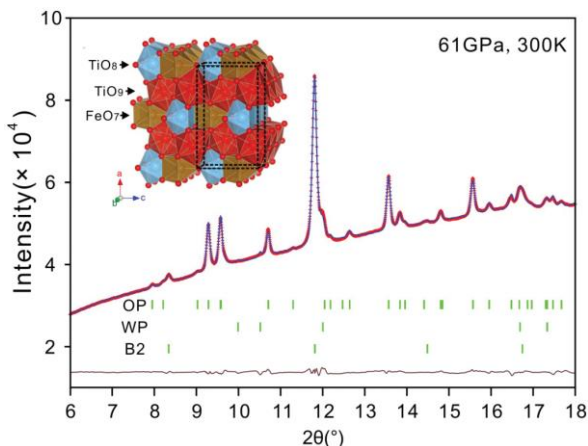
理论模拟与实验XRD对比

- ◆ 高压实验合成了大量的Si和Ge的亚稳相，但这些亚稳相的结构却长期无法确定。利用CALYPSO方法，成功确定了实验上发现的Si和Ge的四方亚稳相结构，均具有T12结构（如图），本工作表明CALYPSO可以应用于亚稳相结构的研究。[参见 *J. Am. Chem. Soc.* 134, 12362 (2012)]



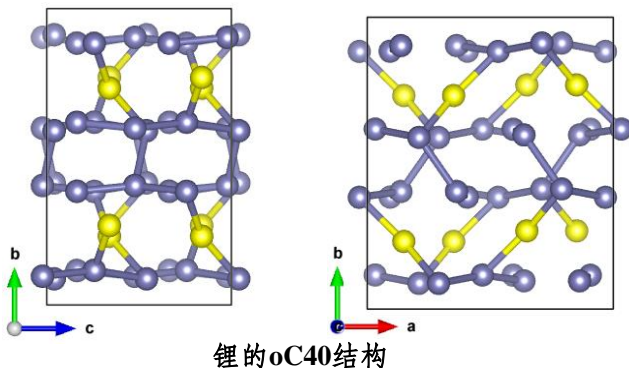
T12结构

- ◆ FeTiO_3 是一种重要的矿物质，其高压相变研究对理解地球内部构造具有重要意义。日本高压科学家Yagi教授实验发现 FeTiO_3 在44万大气压分解为方铁矿和一个结构未知的新型 FeTiO_7 矿物质。利用CALYPSO确定了新型 FeTiO_7 具有正交Imm2结构。[参见 *Am. Mineral.* 97, 568 (2012)]

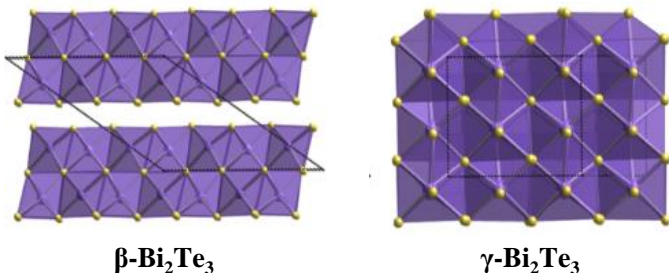


主图: Imm2结构与实验XRD的拟合图谱 插图: Imm2结构图

- ◆ 作为高压研究的模型体系，单质锂的高压相结构问题是高压研究的热点，其中锂的高压半导体相的结构难题长期悬而未解。CALYPSO揭开了这一结构谜团，预言了锂的半导体相结构是一个晶体学单胞内含有40个原子的复杂底心正交oC40结构 [参见 *Phys. Rev. Lett.* **106**, 015503 (2011)]。该结构已被英国爱丁堡大学的Guillaume等人的高压实验证实。[参见 *Nature Phys.* **7**, 211 (2011)]

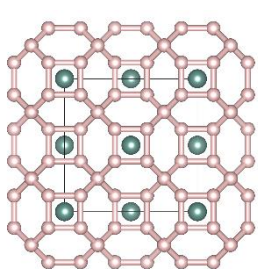


- ◆ 三碲化二铋 (Bi_2Te_3) 在常压下是一种“神奇”的半导体材料，它不仅是性能极为优良的热电材料，而且还是最为简单的拓扑绝缘材料。1972年实验发现 Bi_2Te_3 在高压下存在两个新的超导相。但由于实验条件的限制，这两个高压超导相的结构一直未能确定。利用CALYPSO方法成功确定了这两个高压超导相的结构($\beta\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ 和 $\gamma\text{-Bi}_2\text{Te}_3$)，得到了后续高压同步辐射X-射线衍射实验的证实。[参见 *Phys. Rev. Lett.* **106**, 145501 (2011)]

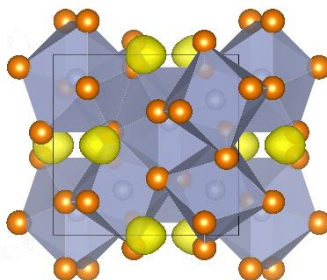


预言的新型物质状态

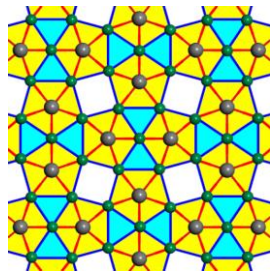
- ◆ 搜寻室温超导体是极具挑战性的科学难题。利用CALYPSO方法对于极端条件下的稀土金属(RE)氢(H)化物进行研究，成功预测出一系列具有奇特笼形结构的稳定富氢金属化合物。理论计算表明在400GPa条件下，包含奇异H32笼形结构的YH₁₀（如图1），其超导转变温度可达303K，有望成为一种潜在的室温超导体。[参见 *Phys. Rev. Lett.* **119**, 107001 (2017)]
- ◆ 压致金属到绝缘体转变违背了高压金属化的传统认识，得到了学术界高度的关注。目前实验上仅在单质元素发现了压力诱导的金属-绝缘体相变。利用CALYPSO结构预测方法，成功确定了长期悬而未决的碱土金属氮化物的高压结构，发现压致金属到绝缘体相变（如图2），该研究首次在化合物中预言了压力诱导的金属到绝缘体相变。[参见 *J. Am. Chem. Soc.* (2017)]
- ◆ 设计含有新奇化学成键的新型平面超配位构型一直是结构化学领域的热点课题。利用CALYPSO结构预测方法，设计出一种含有准平面五配位碳原子的新颖无机二维材料：Be₅C₂（如图3）。理论计算表明其单层材料呈现出和石墨烯类似的零带隙电学性质，并且具有独特的负泊松比，有望在电子学和力学器件领域有着重要的应用前景。[参见 *Nature Commun.* **7**, 11488 (2016)]



YH₁₀结构



Ca₂N结构



Li₄Au结构

- ◆ 寻找高能量密度材料是材料研究领域的热点问题，其中氮化物是一类潜在的高能量密度材料。利用CALYPSO设计了能量稳定的新型 B_3N_5 高能量密度材料（如图1），包含N-N单键，兼具高能量密度和超硬特性。[参见 *Phys. Rev. Lett.* **115**, 105502 (2015)]
- ◆ 寻找新型超硬材料是材料研究领域的热点问题，2012年高温高压合成的类金刚石 BC_3 是典型的超硬材料，其结构长期无法确定，阻碍了对其超硬特性的理解。CALYPSO确定了 BC_3 的类金刚石结构（如图2），是硼-碳化合物中的首个立方结构。[参见 *Phys. Rev. Lett.* **114**, 015502 (2015)]
- ◆ 金属钠在200GPa发生金属-绝缘体转变，突破了高压下绝缘体—金属转变的传统认识。利用CALYPSO方法，预言了钠在15.5TPa的超高压强下重新转变成金属，其金属相具有奇特的硼二十面体结构（如图3）。[参见 *Phys. Rev. Lett.* **114**, 125501 (2015)]
- ◆ 二维材料由于二维空间的局限性，难以形成高配位的平面构型。利用CALYPSO方法，美国科学家设计了一种奇特的高配位二维 Cu_2Si 材料（如图4），具有四中心两电子的成键特征。[参见 *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 2757 (2015)]

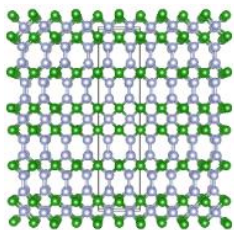


图1: B_3N_5 结构

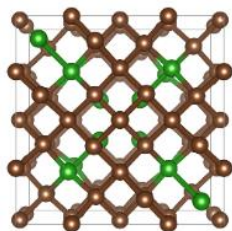


图2: BC_3 结构

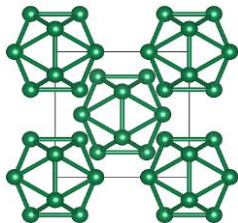


图3: Na结构

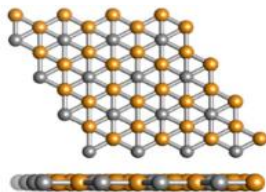


图4: Cu_2Si 结构

- ◆ 与其它惰性气体相比，大气层中**90%**以上的氙气都不知所踪，这在科学上被称为“氙气的消失之谜”。利用CALYPSO预言了氙和铁可以在地核环境下发生化学反应，形成了稳定的 XeFe_3 化合物（如图1），提出了地核可能是氙气的藏身之所。[参见 *Nat. Chem.* 6, 644 (2014)]
- ◆ 将CALYPSO全局表面结构预测方法应用于看似简单的金刚石(100)表面，发现了一类新奇的自组装碳纳米管阵列的表面重构（如图2），类似于有序排列的碳纳米管通过强共价键镶嵌在金刚石的(100)表面上。[参见 *Nature Commun.* 5, 3666 (2014)]
- ◆ 寻找碳的稳定超价态是一个具有挑战的科学难题。利用CALYPSO方法，以固相 CO_2 为例，在1TPa压力附近首次预言了两个稳定的 CO_2 新结构（如图3），其中碳原子具有**6配位**的超价态。[参见 *J. Am. Chem. Soc.* 135, 14167 (2013)]
- ◆ 元素的周期性和内壳层电子的惰性是两个基本化学规律。利用CALYPSO方法发现在高压下Cs被F氧化成高价态，形成了意想不到的新型Cs-F化合物（如图4），其中Cs的内壳层**5p**电子与F形成了Cs-F共价键，突破了内壳层电子不成键的化学规律。[参见 *Nature Chem.* 5, 846 (2013)]

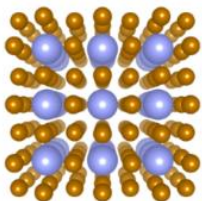


图1: XeFe_3 结构

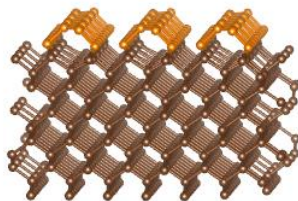


图2: 碳纳米管阵列

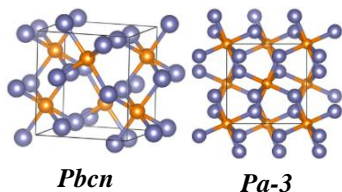


图3: CO_2 结构

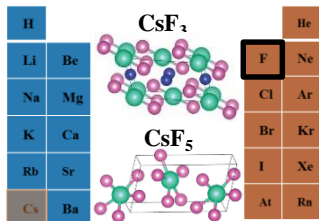


图4: CsF_3 和 CsF_5 结构

- ◆ 冰是水的固态形式，广泛存在于处于超高压状态下的行星内部。研究超高压下冰的存在形式对于理解行星内部的构造及物理化学性质具有重要意义。利用CALYPSO方法，理论上预言了冰在超高压下形成了由 $(\text{OH})^-$ 和 $(\text{H}_3\text{O})^+$ 单元构成的具有部分离子性的冰（如图1）[参见 *Nat. Commun.* **2**, 563 (2011)]
- ◆ 利用CALYPSO方法，在150万大气压下，预言Ca和 H_2 发生反应可以形成新型富含氢 CaH_6 化合物，是潜在的高温超导体（超导温度可能达到235K），其中H形成完美的笼型20面体（如图2），这是一种H的全新成键形式。[参见 *PNAS* **109**, 6463 (2012)]
- ◆ 高压下，三键的分子氮解离成单键的聚合氮，聚合氮是一种潜在的高能材料。利用CALYPSO方法，在263万大气压下，发现了类金刚石聚合氮，具有独特的笼型N10结构（如图3）。[参见 *Phys. Rev. Lett.* **109**, 175502 (2012)]
- ◆ 利用CALYPSO方法，预言固态氧在1900万大气压下发生解离，形成了聚合状的螺旋链O4结构（如图4）。[参见 *PNAS* **109**, 751 (2012)]

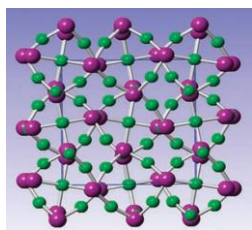


图1: 离子冰结构

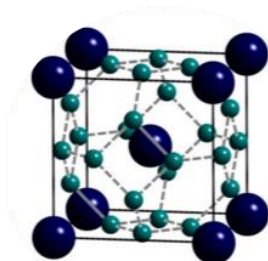


图2: CaH_6 结构

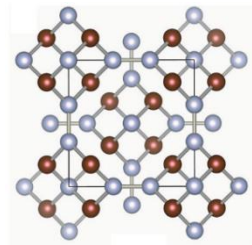


图3: N10结构

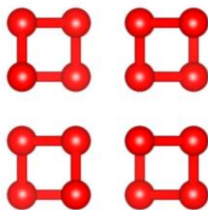


图4: O4结构

代表性文章

- ◆ Reactions of xenon with iron and nickel are predicted in the Earth's inner core
Nature Chem. 6, 644 (2014)
- ◆ Caesium in high oxidation states and as a p-block element,
Nature Chem. 5, 846 (2013)
- ◆ Semi-metallic Be₅C₂ monolayer global minimum with quasi-planar pentacoordinate carbons and negative Poisson's ratio
Nature Commun. 7, 11488 (2016)
- ◆ Self-assembled ultrathin nanotubes on diamond (100) surface,
Nature Commun. 5, 3666 (2014)
- ◆ Pressure-stabilized lithium caesides with caesium anions beyond the -1 state
Nature Commun. 5, 4861 (2014)
- ◆ High Pressure Partially Ionic Phase of Water Ice,
Nature Commun. 2, 563 (2011)
- ◆ Hydrogen Clathrate Structures in Rare Earth Hydrides at High Pressures: Possible Route to Room-Temperature Superconductivity
Phys. Rev. Lett. 119, 107001 (2017)
- ◆ Oxysulfide LiAlSO: A Lithium Superionic Conductor from First Principles
Phys. Rev. Lett. 118, 195901 (2017)
- ◆ Novel Superhard sp³ Carbon Allotrope from Cold-Compressed C70 Peapods
Phys. Rev. Lett. 118, 245701 (2017)
- ◆ Tellurium Hydrides at High Pressures: High-Temperature Superconductors
Phys. Rev. Lett. 116, 057002 (2016)
- ◆ High-energy density and superhard nitrogen-rich B-N compounds
Phys. Rev. Lett. 115, 105502 (2015)
- ◆ Metallic Icosahedron Phase of Sodium at Terapascal Pressures
Phys. Rev. Lett. 114, 125501 (2015)

- ◆ Superhard BC₃ in Cubic Diamond Structure
Phys. Rev. Lett. **114**, 015502 (2015)
- ◆ High-Pressure Hydrogen Sulfide from First Principles: A Strongly Anharmonic Phonon-Mediated Superconductor
Phys. Rev. Lett. **114**, 157004 (2015)
- ◆ Stacking Principle and Magic Sizes of Transition Metal Nanoclusters Based on Generalized Wulff Construction,
Phys. Rev. Lett. **111**, 115501 (2013)
- ◆ Global structural optimization of tungsten borides
Phys. Rev. Lett. **110**, 136403 (2013)
- ◆ Towards direct-gap silicon phases by the inverse band structure design approach
Phys. Rev. Lett. **110**, 118702 (2013)
- ◆ Cagelike Diamondoid Nitrogen at High Pressures
Phys. Rev. Lett. **109**, 175502(2012)
- ◆ Predicted Novel High-Pressure Phases of Lithium,
Phys. Rev. Lett. **106** 015503(2011)
- ◆ Substitutional Alloy of Bi and Te at High Pressure
Phys. Rev. Lett. **106** 145501(2011)
- ◆ Novel Superhard Carbon: C-Centered Orthorhombic C₈
Phys. Rev. Lett. **107**, 215502 (2011)
- ◆ Pressure-Stabilized Semiconducting Electrides in Alkaline-Earth Metal Subnitrides
J. Am. Chem. Soc. **139**, 13798 (2017)
- ◆ Ternary Gold Hydrides: Routes to Stable and Potentially Superconducting Compounds
J. Am. Chem. Soc. **139**, 8740 (2017)
- ◆ Gold as a 6p-Element in Dense Lithium Aurides
J. Am. Chem. Soc. **138**, 4046 (2016)
- ◆ FeB₆ Monolayers: The Graphene-like Material with Hypercoordinate Transition Metal
J. Am. Chem. Soc. **138**, 5644 (2016)

- ◆ **Structural Diversity and Electron Confinement in Li₄N: Potential for 0-D, 2-D, and 3-D Electrides**
J. Am. Chem. Soc. **138**, 14108 (2016)
- ◆ **First-principles Prediction of Thermodynamically Stable Two-Dimensional Electrides**
J. Am. Chem. Soc. **138**, 15336 (2016)
- ◆ **Direct Band Gap Silicon Allotropes**
J. Am. Chem. Soc. **136**, 9826 (2014)
- ◆ **Structural Evolution of Carbon Dioxide under High Pressure**
J. Am. Chem. Soc. **135**, 14167 (2013)
- ◆ **The Unusual and the Expected in the Si/C Phase Diagram**
J. Am. Chem. Soc. **135**, 11651 (2013)
- ◆ **Tetragonal Allotrope of Group 14 Elements**
J. Am. Chem. Soc. **134**, 12362 (2012)
- ◆ **Predicted lithium-boron compounds under high pressure**
J. Am. Chem. Soc. **134**, 18699 (2012)
- ◆ **Predicting Two-Dimensional Boron-Carbon Compounds by the Global Optimization Method**
J. Am. Chem. Soc. **133**, 16285 (2011)
- ◆ **Potential high-Tc superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **114**, 6990 (2017)
- ◆ **Stabilization of ammonia-rich hydrate inside icy planets**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **114**, 9003 (2017)
- ◆ **Polymorphism and electronic structure of polyimine and its potential significance for prebiotic chemistry on Titan**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **113**, 8121 (2016)
- ◆ **Crystal structures and dynamical properties of dense CO₂**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **113**, 11110 (2016)
- ◆ **High-pressure phase of brucite stable at Earth's mantle transition zone and lower mantle conditions**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **113**, 13971 (2016)

- ◆ **Superconductive “Sodalite”-like Clathrate Calcium Hydride at High Pressures**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA 109, 6463 (2012)
- ◆ **Spiral Chain O₄ Form of Dense Oxygen**
Proc. Natl. Acad. Sci. USA 109, 751 (2012)
- ◆ **Novel Two-Dimensional Silicon Dioxide with in-plane Negative Poisson's Ratio**
Nano Lett. 17, 772 (2017)
- ◆ **Graphene-like Two-Dimensional Ionic Boron with Double Dirac Cones at Ambient Condition**
Nano Lett. 16, 3022 (2016)
- ◆ **Dirac State in the FeB₂ Monolayer with Graphene-Like Boron Sheet**
Nano Lett. 16, 6124 (2016)
- ◆ **Room Temperature Quantum Spin Hall Insulators with a Buckled Square Lattice**
Nano Lett. 15, 3230 (2015)
- ◆ **SiC₂ Siligraphene and Nanotubes: Novel Donor Materials in Excitonic Solar Cells**
Nano Lett. 13, 5431 (2013)
- ◆ **Two-Dimensional Boron Hydride Sheets: High Stability, Massless Dirac Fermions, and Excellent Mechanical Properties**
Angew. Chem. Int. Edit. 55, 10292 (2016)
- ◆ **Mercury under Pressure acts as a Transition Metal: Calculated from First Principles**
Angew. Chem. Int. Edit. 127, 9412 (2015)
- ◆ **Two-Dimensional Boron Monolayers Mediated by Metal Substrates**
Angew. Chem. Int. Edit. 127, 13214 (2015)
- ◆ **Be₂C Monolayer with Quasi-Planar Hexacoordinate Carbons: A Global Minimum Structure**
Angew. Chem. Int. Edit. 53, 7248 (2014)

开发团队

CALYPSO方法和软件最初由马琰铭和王彦超于2006年底开始研发，后期得到吕健和朱黎的加盟，历经近4年时间于2010年成功推出了CALYPSO 1.0版本。近期开发团队又吸纳了王晖、李全、张立军、鲁少华、殷克涛、邵学成、高博、李欲伟、高朋越、苏传讯、童群超和Maosheng Miao的加入，目前已经推出CALYPSO 6.0版本。我们诚挚邀请其他有志同行加入到开发团队。

未来展望

CALYPSO软件历经多年的发展，已经颇具规模并呈现出良好上升势头。CALYPSO团队希望得到国内同行的更多支持，最终把CALYPSO发展成为国际上最具影响力的结构搜索软件平台，通过这一平台更好的促进我国在结构搜索研究领域的发展。

研讨会

目前，已在北京、洛阳、四川和南京成功举办了四次CALYPSO研讨会，培训国内外用户近千人次。

第一届 CALYPSO 研讨会合影留念



第二届 CALYPSO 研讨会合影留念



中国·洛阳·洛阳师范学院

2014年10月

第三届 CALYPSO 研讨会

主办单位：吉林大学超硬材料国家重点实验室
四川大学物理科学与技术学院
2015.10.30 - 2015.11.01 中国·成都

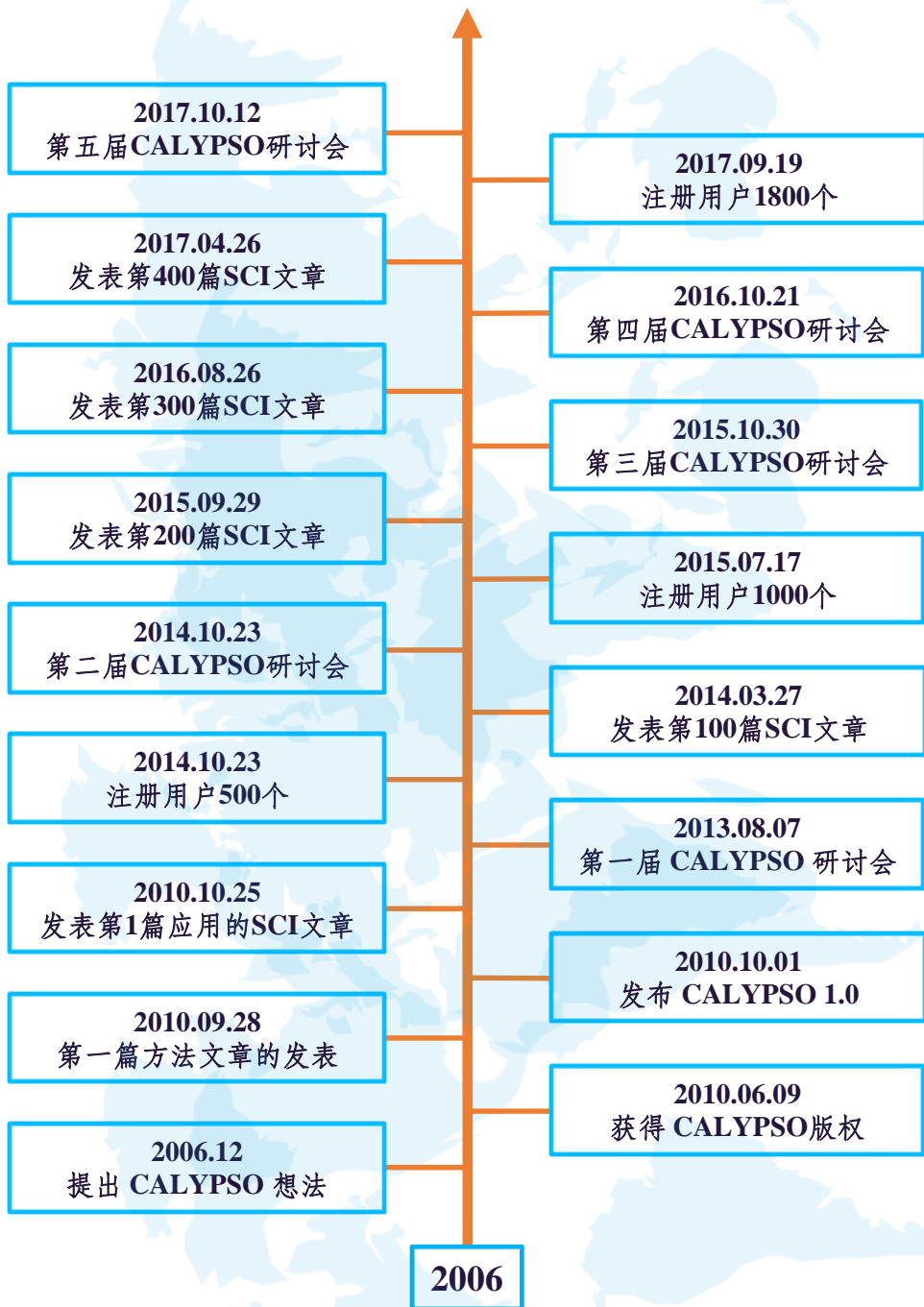


第四届 CALYPSO 研讨会合影

2016.10 中国·南京



CALYPSO大事记



CALYPSO



技术支持: 王彦超 wyc@calypso.cn
吕 健 lvjian@calypso.cn
朱 黎 zl@calypso.cn
王 晖 huiwang@calypso.cn
李 全 liquan777@calypso.cn
张立军 zlj@calypso.cn