



## 2017材料科学中的拓扑学方法及应用学术交流会

尊敬的 \_\_\_\_\_ 先生/女士，您好！

2017材料科学中的拓扑学方法及应用学术交流会将于2017年10月在北京召开。

### 会议内容

在过去15年中，拓扑方法得到了显著的发展，基于拓扑方法分析大体量晶体数据的系统性和合理性也得到了有效的证明。拓扑学方法能够应用于大量的晶体数据分析，提供定性或半定量预测。现在，对新材料整体拓扑结构的动态流程化分析，寻找配位基团的局部拓扑结构，金属原子和配体的配位关系，以及整个网格的拓扑结构之间的关系成为结构分析的重要任务。

在本次学术交流会，我们将学习如何使用晶体化学中的定性和半定量几何和拓扑方法，分析复杂晶体结构和快速数据挖掘。

萨马拉大学 ( Samara University )

国际结晶学联合会数学与理论晶体学委员会 ( International Union of Crystallography Commission on Mathematical and Theoretical Crystallography )

### 一、组织单位及专家

**主办单位：**迈海材料基因组国际研究院 ( MSEA International Institute for Materials Genome )

迈海材料基因组国际研究院位于河北省固安新兴产业示范区清华大学中试孵化基地，由华夏幸福、清华产业园、陕西金控等产业资本投资设立。迈海研究院致力于发展具有国际影响力的，从化学元素开始的结构/功能材料创新设计方法和先进制备技术，实现从微观探索到宏观调控的无缝过渡；开发高通量数据分析模型和计算软件，加快新材料的产业化应用速度；发展满足国家战略新兴产业需求的材料创新与产业平台；促进全球知识的交叉融合，激发创新思想，培养具有国际竞争力的科技精英和领军企业家。迈海研究院由千人计划教授为带头人，采用企业化运作模式，联合国内外知名高校，搭建国际化的材料基因组研究中心，引入全球最顶尖材料基因组技术，实现科技成果转化，产生一系列具有绝对竞争优势的关乎国计民生的产业链。

**专 家：** Vladislav A. Blatov

萨马拉国立大学理论材料科学中心 ( SCTMS ) 教授 ( 俄罗斯·萨马拉 )

西北工业大学材料学院 兼职教授 ( 中国·西安 )

Blatov教授1965年7月出生于俄罗斯萨马拉州，1991获俄罗斯科学院无机化学所副博士学位，1998获无机化学博士学位。他的研究从材料的晶体结构入手，以理论晶体化学、几何和拓扑方法、计算物理为基础，建立材料计算模型，并编写相关计算软件和数据库。他对化学元素、金属间化合物、分子晶体、配位聚合物、离子化合物等化合物结构和合成的研究有深厚的学术造诣，其应用领域包括能源、催化、输运等。他从1989年起开始开发晶体结构几何和拓扑分析方法，这些方法已发展成为该领域著名的TOPOS软件，其注册用户数已超过3000人，其中1/3都来自中国。该软件已成为描述物质结构和进行物质分析的标准工

具。他在萨马拉国立大学主讲量子力学和量子化学、应用量子化学、晶体化学、物质结构、固体化学、数学方法化学、计算机化学、数值计算与编程和化学信息学等课程，是一位高水平的科学家和教育家。2013年4月，他获得俄罗斯政府的巨额资助计划（Mega grant），与意大利米兰大学的M. Proserpio教授一起创建萨马拉理论材料科学中心（SCTMS），开展材料基因组研究。2016年受聘为西北工业大学材料学院兼职教授和博导。2016年，他被汤森路透评为俄罗斯被引次数最高的几位化学家之一，总的被引次数超过6000次。

**主要研究方向：**晶体化学中的几何和拓扑方法及其计算机实现，并开发了TOPOS / ToposPro拓扑分析程序包。

## Eugeny V. Alexandrov

萨马拉大学理论材料科学中心（SCTMS）博士（俄罗斯·萨马拉）

2009年毕业于萨马拉国立大学，2014年获得尼古拉夫无机化学研究所（俄罗斯新西伯利亚）无机化学博士学位。

**主要研究方向：**配位聚合物的拓扑分析及其在新材料设计中的应用。

Eugeny在高影响力的期刊上发表了12篇论文，并参与了ToposPro拓扑类型集合的开发。同时担任前五届ToposPro会议讲师。

## 二、会议地点及时间

时间：2017年10月13日-10月15日

地点：河北省廊坊市固安县新兴产业示范区清华大学中试孵化基地（北京天安门向南50公里）

## 三、活动收获

### 1.会议收获

- A.学习现代拓扑学方法在晶体化学和材料科学中应用，及相应的算法，软件，数据库和专家系统;
- B.学习如何将拓扑学方法应用于分析各种类型的晶体和结晶材料的技能;
- C.在个人研究领域，学习如何应用TOPOS软件和数据库来分析;
- D.学习如何将拓扑学和DFT方法结合使用来设计新材料并预测其物理性质。

### 2.额外收获

- A.迈海材料基因组国际研究院实验中心大型仪器设备使用机会；
- B.近20亿材料产业基金支持，包含个人创业孵化服务（10-200万不等的资金支持）；
- C.有机会获得专家提供的个人学术论文指导；
- D.材料专业学生毕业工作机会。

## 会议日程

时间	讲师	主题
09:00-09:15		会议安排介绍

10月13日	09 : 15-10 : 45	V.A. Blatov	计算晶体化学分析
	10 : 45-11 : 00		休息
	11 : 00-12 : 30	V.A. Blatov, E.V. Alexandrov	ToposPro介绍
	12 : 30-14 : 00		午饭休息
	14 : 00-15 : 30	V.A. Blatov, E.V. Alexandrov	0D, 1D, 2D和3D结构可视化
	15 : 30-15 : 45		休息
	15 : 45-17 : 15	V.A. Blatov	晶体化学分析中的方法, 软件, 数据库和专家系统的讲解
	17 : 15-18 : 00		问答环节
10月14日	09 : 00-10 : 30	V.A. Blatov E.V. Alexandrov	晶体结构的简化方法
	10 : 30-10 : 45		休息
	10 : 45-12 : 15	V.A. Blatov E.V. Alexandrov	网格拓扑识别方法, TTD数据库集合和SCTMS在线服务
	12 : 15-14 : 00		午饭休息
	14 : 00-15 : 30	V.A. Blatov, E.V. Alexandrov	分子晶体和金属有机框架结构的拓扑学分析方法
	15 : 30-15 : 45		休息
	15 : 45-17 : 15		用ToposPro计算天然拼接物质及其参数, 分析沸石和快离子导体。
	17 : 15-18 : 00		问答环节
	9 : 00-9 : 45	V.A. Blatov	金属间化合物的纳米团簇表示

10月15日		E.V. Alexandrov	
	9 : 45-10 : 30	V.A. Blatov E.V. Alexandrov	拓扑学方法与密度泛函理论的联合应用
	10 : 30-10 : 45		休息
	10 : 45-12 : 15	V.A. Blatov E.V. Alexandrov	数据挖掘和知识库在晶体化学和材料科学中应用
	12 : 15-12 : 30		会议总结

## 会议嘉宾

## 会议门票

### 会议须知

### 1.参会费用

参会类型	2017年10月1日之前	2017年10月1日之后
正式代表	4300元	4500元
学生代表	3200元	3500元

### 2.会费明细

会议培训费

手册资料费

超算使用费

住宿费

午餐费

北京至固安往返接送交通费

### 3.参会提示

需携带个人电脑，本人身份证及3日所需生活用品。

### 会议交通

地点：清华中试孵化基地（迈海材料基因组国际研究院）

交通：**1.北京西站**：地铁7号线-地铁4号线大兴线（菜市口）-固安通勤班车（天宫院）-固安4路（固安二中）-清华大学中试孵化基地（幸福医院）

**2.北京南站**：地铁4号线大兴线-固安通勤班车（天宫院）-固安4路（固安二中）-清华大学中试孵化基地（幸福医院）

**3.首都机场（T3航站楼）**：机场大巴北京南站线-地铁4号线大兴线（陶然亭）-固安通勤班车（天宫院）-固安4路（固安二中）-清华大学中试孵化基地（幸福医院）

