**上海硅酸盐所计算材料相关创新项目申请指南**

我所在无机材料的制备、性能与结构表征、及其工程化研究等领域具有良好的工作基础，在国际国内享有盛誉。近年来，材料科学与应用技术的发展对新材料的研发提出了更高的要求，计算材料科学与材料设计在无机材料的探索与应用研究中占有越来越重要的地位，引起了国际材料界的广泛关注。例如，在新材料探索中，高通量材料计算、机器学习技术与材料制备技术相结合，为材料新结构、新功能的发现提供了快捷通道；在材料开发、器件与系统集成中，结合力学、物理与化学过程的综合性能优化的多尺度计算为材料制备工艺的寻优、系统集成的优化、服役行为评估以及寿命预测等重要环节提供了强有力支撑。

经过多年的发展，集成计算材料研究中心（以下简称“计算中心”）已经建立了面向全所的高性能计算平台，配置了微观、介观、宏观的材料多尺度计算软件，并投入一定的创新经费支持所内各课题组从事计算材料相关的创新性尤其是合作性课题研究，对推动全所从事先进无机材料基础研究和应用研究领域的实验课题组与材料计算的有机结合和协同研究发挥了积极作用。计算材料方法已经在新能源与催化材料、生物材料、人工晶体、复合材料、无机涂层、功能陶瓷等领域得到广泛应用。“十三五”期间，我所获得多项国家重点研发“材料基因工程”专项资助。随着人工智能技术在科技领域应用推广，材料智能化研究已经成为研究所一个重要培育发展方向。

计算中心本着开放联合的运行机制，积极推进合作创新研究。在所科技发展部的大力支持下，计算中心2021年继续部署所创新科技项目，以提升我所在计算材料领域的创新能力。各课题组均可根据本课题组在研方向，在结合实验开展的微观、介观和宏观层次的材料结构—性能关系研究和材料设计等方向提出申请，重点鼓励机器学习、高通量计算与实验紧密结合在材料设计与优化应用研究，要求与计算中心科研人员联合申请。创新课题的研究期限一般为两年，资助额度为6～8万元，纳入上海硅酸盐研究所所创新项目管理。课题申请经本领域相关专家评审选优，被批准的课题，可优先利用包括机器学习方面的计算中心平台。

2021年部署的计算材料相关创新课题研究从2021年5月8日开始，本次申请截止时间为2021年6月4日，电子版申请书提交至秘书郑珊。

高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室集成计算材料研究中心

联 系 人：郑 珊，钱继勤

联系电话：5241-2608，6990-6705

E-mail地址：zhengshan@mail.sic.ac.cn；qjqmoney@mail.sic.ac.cn