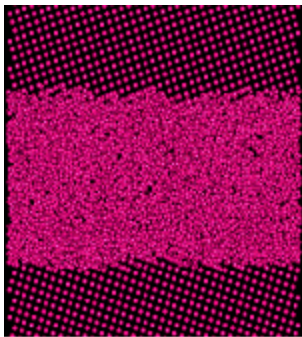




计算材料学领域的年轻人—王绍青研究员

王绍青，1963年7月生于河北省邢台市。1984年毕业于山东大学物理系，1989年和1992年于中科院金属所分别获得硕士和博士学位，师从于叶恒强院士。1992年5月至2000年10月在中科院固体原子像开放实验室工作。2000年底随原实验室并入新成立的中科院金属所沈阳材料科学国家（联合）实验室至今。其间，于1996年获日本科学技术厅资助以STA研究员身份赴日本国立无机材质研究所从事了高温超导体物性方面的研究。1997-1998年获英国皇家学会奖学金资助于剑桥大学材料系从事了GaN晶体缺陷结构方面的研究。2003年获中德科学基金项目资助到德国亚琛工业大学金属冶金研究所进行了Al-Cu合金析出相的结构与结构演化过程方面的研究。1998年破格晋升为研究员，2000年被聘为博士生导师。

研究成果主要有，提出了Al-Zn-Mg二十面体准晶相的基本结构单元随机堆垛原子结构模型，该模型合理地解释了Al-Zn-Mg合金的原子结构由非晶过渡到准晶和晶体的整个过程。在原子像定量化分析与图像处理研究方面，提出了适用于定量化原子像结构分析的原子像谷位网络分割方法并编制了数万行的图像处理软件。采用该技术可实现对实验高分辨原子像中微区结构单元的高精确度定量化分析。在计算材料科学领域的研究中，采用分子动力学方法研究了氮化镓薄膜中的畴界结构、铜及镍铝合金晶界的熔化和预熔化行为，提出了通过高温急冷实现界面改性的可行性。采用固体能带理论计算研究了钛系形状记忆合金的相变问题，采用平面波赝势方法研究了氮化镓及其它III-V族半导体的结构、力学与电子性质；发现了III-V族和IV族半导体的体模量与晶体单胞体积的倒数成正比的普适规律。他和所指导的研究生在Ag小颗粒熔化行为分子动力学模拟方面的研究工作被美国《*J. Phys. Chem.*》杂志审稿人评价为是位列于该研究领域前20%的优秀工作。



铜双晶界面的预熔化

他现已在国内外发表学术论文近百篇，包括SCI期刊论文50余篇。他曾承担完成了“固体精细结构定量化分析”辽宁省博士启动基金项目、“计算材料学基础”国家攀登预选项目、“新材料计算设计”等，并以主要成员参加完成了三项国家自然科学基金项目。已完成的项目中有一项获得了国家自然科学基金四等奖和中科院自然科学奖二等奖，一项获得了中科院自然科学奖三等奖。

他目前承担的研究项目主要有：“计算材料学”国家基础研究重大项目、“铝铜合金GPI区相变”中德科学基金项目、“GaN晶体缺陷性能”国家自然科学基金项目等。主要研究领域包括：

(1) 固体界面物理匹配与结构设计：采用分子动力学和第一原理量子理论方法进行界面电子、原子结构的计算，对界面的物理匹配，包括电子态匹配，原子相互作用匹配等进行研究。理论分析界面的应力弛豫，杂质偏聚的工作机理。计算模拟界面与点缺陷，位错的相互作用。

(2) 合金中析出相的形成、结构与性质：采用计算模拟方法研究微量元素、杂质等点缺陷在晶体中的扩散机制和热运动规律。理解晶体中析出相的析出过程、形成条件、结构和性质。

(3) 新型功能材料的物理性质与结构设计：采用第一原理计算方法研究光电半导体、高温超导体等新型功能材料的结构、力学和物理化学性质，理解这些材料的光电、声电耦合机制。探索新型功能材料结构与成分的优化选择方法。

