

新一代ARP (<https://portal.arp.cn/>) 网上办公 (<https://newoa.arp.cn/>)  
中心业务网站 (<http://www.cnic.cn>) 中国科学院 (<https://www.cas.cn/>)  
English (<http://english.cnic.cas.cn/>)



(/)

---

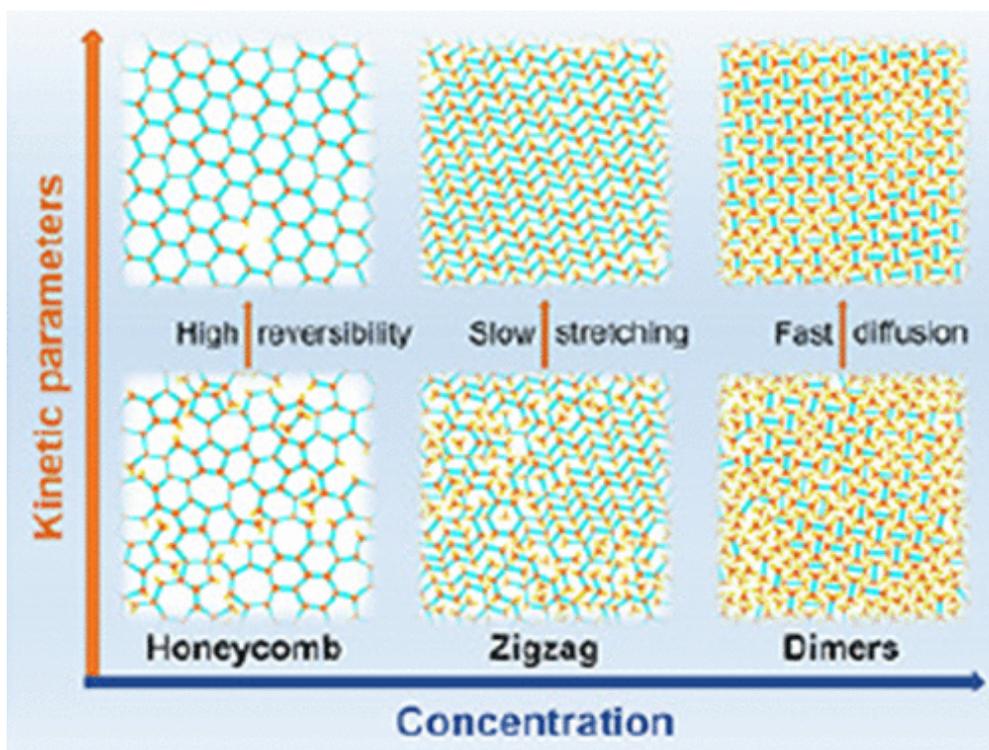
## 工作动态

# “东方”超级计算系统助力探索低维纳米结构材料构建新策略

2024-06-28 10:29 | 【放大 缩小】 | 浏览量: 256

由于具有独特的光、电、磁、机械等性能，低维纳米结构材料在纳米器件制备中具有广阔的应用前景。近年来，我中心高性能计算部对吉林大学吕中元/朱有亮团队进行了持续的技术支持，完成了用户自研分子动力学模拟软件PYGAMD/GALAMOST在“东方”超级计算系统上的移植与优化，有力的保障了用户团队对不同结构和形态低聚物形成过程的研究，帮助研究人员通过系列反应力场动力学模拟深入探讨低维结构调控因素和形成机理，明晰了纳米结构形成的浓度依赖物理本质，并为纳米材料器件的高质量设计开辟了新途径。

该研究成果发表于高分子及化学领域权威期刊Macromolecules，获国家重点研发计划项目、国家自然科学基金重点项目、面上项目等资助。中心高性能计算部为该工作有效利用中国科学院算力互联网算力资源开展研究提供了技术支持，获用户致谢。



### 单体浓度和动力学扩散对结构形态的调控

相关成果: X. K. Yu, R. Shi, L.L. Zhang, H.Y. Zhao, Y.L. Zhu, and Z.Y. Lu, Kinetics of On-Surface Oligomer Formation Controlled by Concentration, Macromolecules, DOI: 10.1021/acs.macromol.3c02153.

责任编辑: 郎杨琴

下一篇: “东方” 超级计算系...



(//www.cas.cn)

**联系我们** (//cnic.cas.cn/../../lxwm/)

**网站地图** (//cnic.cas.cn/../../wzdt/)

1996 - 2024 中国科学院计算机网络信息中心 版权所有

京ICP备05002857号-1 (http://beian.miit.gov.cn/) 京公网安备11010802030922号

电话: 010-58812280 Email: supervise@cnic.cn



(<https://bszs.conac.cn/sitename?>

method=show&id=0922228838550AA7E053022819AC0216)