自由探索计划“天目启航”专项项目选题征集表

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **教师姓名** | **夏斯浩** | **学 院** | **物理学院** |
| **职 称** | **副研究员** | **联系方式** | **15005156129** |
| **邮 箱** | **Sihao\_rst@nuaa.edu.cn** | **研究方向** | **光电功能材料与器件** |
| **项目名称** | **机器学习结合DFT的AlGaN表面金属原子吸附研究** | | |
| **项 目 简 介（200字左右）** | **本项目旨在利用第一性原理计算方法，深入探究AlGaN对不同种类金属原子的吸附性质。研究将重点考虑材料表面类型、表面组分以及覆盖度等因素对吸附行为的影响，以期从微观层面揭示AlGaN对金属原子吸附的机理。通过第一性原理计算，构建多种吸附模型，并计算其吸附能和功函数形成数据集。本研究将分析吸附特征与目标之间的内在联系，并运用前沿的机器学习算法对计算数据进行训练以建立预测模型。随后建立新吸附模型得到数据集外的新数据，考察训练模型的泛化性能和可转移性。** | | |
| **人 员 技 术 需 求** | **主要职责、任务** | **需求人数** | **专业及技能要求** |
| **DFT计算表面结构** | **1** | **不限** |
| **基于数据库的机器学习** | **1** | **不限** |
| **整理结果及图片绘制** | **1** | **不限** |
|  |  |  |
|  |  |  |
| **备 注** |  | | |