

胡逸豪 Yihao Hu | 26 岁



模拟计算工程师 AI for Science



邮箱: huyihao@westlake.edu.cn

手机: (+86)17367078125

<https://github.com/huiihao>

EDUCATION

- **浙江大学** 本科
物理学院, 物理学。 2016.09 – 2020.07
- **浙江大学 (学籍、学位证、毕业证) & 西湖大学 浙江省量子材料重点实验室** 博士
浙江大学 – 西湖大学联合培养项目, 计算凝聚态物理。研究方向: **人工智能 × 铁电物理**。 2020.09 – 2025.12

INTERNSHIPS

- **鹏城实验室 深圳网络空间科学与技术省实验室** 访问交流
研究方向: 量子信息 & 量子计算。 2019.07 – 2019.10

PROJECTS

- **科研项目**
 - 参与浙江省自然科学基金重点项目 “数据驱动型多尺度建模理性设计高熵铅基固溶体”
- **出版教材**
 - “Multiscale simulations of ferroelectric oxides”, Jiawei Huang, Zhuang Qian, Yihao Hu, Qisheng Yu and Shi Liu, 《Ferroelectrics: Advances in fundamental studies and emerging applications》, IOP Publishing, ISBN: 9780750339759 **章节撰写**
 - 《电子材料计算》, 刘仕, ..., 胡逸豪 et al., 高等学校电子材料系列教材, 清华大学出版社 **排版整理&章节撰写**

• 发表论文

已发表 9 篇, 一作 3 篇 (下划线, 共一标记为 †), 代表作 3 篇 🔥, 未发表 1 篇 🔗 Scopus Author ID: 57425386400

🔥 Yihao Hu, Jiyuan Yang, Shi Liu*, “Giant Piezoelectric Effects of Topological Structures in Stretched Ferroelectric Membranes”, **Phys. Rev. Lett.** 133, 046802 (**Editors’ Suggestion**) **纯计算、原型钙钛矿、革命性预测**

💎 **Editors’ Suggestion**: 大约每 6 篇被 PRL 接收的论文中只有 1 篇会被选为编辑推荐, 意味着这项研究在物理学的某个领域具有重要的科学意义, 可能会对科学界产生深远的影响。

📖 **文章内容简介**: 利用 “AI+分子动力学” (DPMD) 的研究手段, 发现经典铁电材料钛酸铅中由电偶极子构建的拓扑结构——**铁电螺旋**, 该新奇结构会产生巨大的压电效应。未来, 铁电螺旋在研究手性声子、非共线铁电拓扑等方面也有望发挥独特的作用。项目研究综合运用了**第一性原理计算、机器学习、分子动力学模拟、唯象理论**等多种计算物理方法。DPMD 通过深度学习模型学习从第一性原理计算得到的数据, 能够更精确地描述原子间的相互作用, 从而提供比传统经验力场更准确的模拟结果。

🔥 Ching-Che Lin, Yihao Hu(所有理论计算), ..., and Lane W. Martin, “Domain-wall enhanced pyroelectricity”, **Phys. Rev. X** 15, 011063 **PRX 2023 年发文量 194 篇** (≈ *Nature Physics*) **热释电材料**

🔥 Jiawei Huang†, Yihao Hu†, and Shi Liu*, “Origin of ferroelectricity in magnesium doped zinc oxide”, **Phys. Rev. B** 106, 144106 **Citations: 20+** **传统半导体、压电材料**

◦ Changming Ke, Yihao Hu and Shi Liu*, **Nanoscale Horiz.** 8, 616-623 **III-V 族二维半导体**

◦ [实验合作] ..., Yihao Hu(部分理论计算), ..., **Nat. Commun.** 16, 1818 **新型反铁电材料**

◦ [实验合作] ..., Yihao Hu(部分理论计算), ..., **ACS Appl. Energy Mater.** 6, 24, 12379 **热电材料**

◦ [实验合作] Tingting Luo†, Yihao Hu†(所有理论计算), ..., **Mater. Today Phys.** 37, 101211 **热电材料**

◦ [实验合作] ..., Yihao Hu(所有理论计算), ..., **Mater. Today Nano** 20, 100275 **钙钛矿材料**

◦ [实验合作] ..., Yihao Hu†(所有理论计算), ..., **Submitted: Nature** 二轮审稿 **高熵固溶体**

◦ ..., **HU Yihao**, ..., “Grain-size Characteristics and the Implications for Sedimentary Facies of the Cenozoic Sediments in the Dahonggou Section of the Qaidam Basin”, **Geol. J. China Univ.** 31(03): 324-334 **跨领域**

SKILLS

- **专业软件:** VASP, Quantum Espresso, ABINIT, LAMMPS, DP-GEN, DeePMD-kit
- **掌握技能:** Python, Shell, LaTeX, HTML/CSS, MATLAB, 3ds Max, Photoshop, ffmpeg

PERSONAL STATEMENT

- 所有文章中，若为**第一作者或共同第一作者**，则担任该课题的**主要负责人、推动者**。以 *PRL* 这篇代表作为例，对导师提出的几个研究方向做了**较为全面的调研**，最终选择了钙钛矿体系这一经典材料为研究对象。在该体系中发现了新奇的偶极排布结构，最初被导师认为是计算误差，后通过大量计算数据证明该结构是真实的，**使导师信服并围绕其开展后续工作**。项目需要使用分子动力学的方法，故**寻求第二作者的帮助，学习该方法并达到熟练的程度**，而后运用该方法产出了文章 75% 以上的数据，科学数据容量达到 **20TB**。**与导师讨论并梳理**如何处理分析数据，并**甄别所有课题组成员对数据可视化的建议**，最终将海量的数据凝练为易懂的图片。灵光乍现下，**花费一天时间将该新奇结构的理论模型建立并将具体的公式推导过程完成**，该模型可以很好地与模拟数据拟合。在和导师的共同努力下将 **7 页正文、24 页支持材料**完成。该新奇结构将压电系数较普通铁电相提升了 400%，并填补了铁磁拓扑结构在铁电领域的最后一块空白。
- 所有文章中，若为**共同第一作者或第二作者**，且为合作项目，则担任该课题的**理论计算部分唯一负责人、合作者**。在导师的督导下，**与实验组交流并梳理出对方的需求**，然后进行相关的计算模拟。**多次交流讨论**，不断修改数据、绘图以**达到对方期望**。投稿时，**及时响应实验组的提问**并提供其所需的内容。与国外实验组合作时，**合理地安排会议时间**。
- 教材使用 LaTeX 编译完成，担任**作者、(非出版社) 编辑**。以中文教材为例，**技术主导**：选择 LaTeX 模板，制定格式规范，统一排版标准，负责最终整合。**内容把控**：审阅所有 word、LaTeX 稿件，提出修改意见，确保质量。**统筹全局**：协调其他作者，合理催促稿件提交，分配纠错排版任务给参与的组员。**额外贡献**：亲自完成整本书最繁琐的公式输入部分。
- 可进行较为简单的三维科研概念图绘制。**独立设计和构建课题组网页**：挑选开源模板，花费三天左右的时间对其进行全面的修改后，完成了课题组网页 (<https://liutheory.westlake.edu.cn/>)，维护并更新了四年。

CONFERENCES

- The 35th Annual Workshop 2024 Fundamental Physics of Ferroelectrics, *Giant piezoelectric effect in stretched PbTiO₃ membranes*, Washington, D.C., **USA**, February 4-7, 2024. **Poster**
- The Conference of Condensed Matter Physics 2024, *Giant Piezoelectric Effects of Topological Structures in Stretched Ferroelectric Membranes*, the Yangtze River Delta Physics Research Center, Liyang, **China**, August 4-9, 2024. **Poster**
- 中国物理学会 2024 秋季学术会议, 利用深度学习的分子动力学预测螺旋铁电及巨压电效应, 海南国际会展中心, 海口, **中国**, October 10-13, 2024. **Poster**
- “论道”五校联合博士生学术论坛, 利用机器学习预测螺旋铁电拓扑结构及其性质, 上海交通大学李政道研究所, 上海, **中国**, December 17-18, 2024. **Best Poster**

ACHIEVEMENTS

- **个人荣誉:** **浙江大学国家奖学金**, 浙江大学优秀毕业研究生, 浙江大学“学术(实践)创新能力”单项荣誉
- **体育竞赛**
 - 第八届全国大学生**龙舟**锦标赛, 中国大学生体育协会 *et al.*, 混合组 100 米直道赛 **第 2 名**
 - 第八届全国大学生**龙舟**锦标赛, 中国大学生体育协会 *et al.*, 混合组 200 米直道赛 **第 4 名**
 - 第八届全国大学生**龙舟**锦标赛, 中国大学生体育协会 *et al.*, 混合组 500 米直道赛 **第 3 名**
 - 2019 年中华**龙舟**大赛·海南万宁站, 国家体育总局社会体育指导中心、中国龙舟协会、中央电视台体育频道 *et al.*, 青少年男子组 100 米直道竞速 **第 3 名**
 - 2019 年中华**龙舟**大赛·海南万宁站, 国家体育总局社会体育指导中心、中国龙舟协会、中央电视台体育频道 *et al.*, 青少年男子组 200 米直道竞速 **第 5 名**
 - 2019 年中华**龙舟**大赛·海南万宁站, 国家体育总局社会体育指导中心、中国龙舟协会、中央电视台体育频道 *et al.*, 青少年男子组 500 米直道竞速 **第 6 名**
 - 第十五届全国大学生**攀岩**锦标赛, 中国大学生体育协会 *et al.*, 甲 A 男子速度赛 **第 ? 名**