

薛岚天

✉ xlt_plucky@163.com

教育背景

- 吉林大学, 物理学院, 硕博连读 (2017.09 - 至今)
凝聚态物理 (课题组组长: 马琰铭, 指导教师: 谢禹、王彦超)
- 吉林大学, 物理学院, 理学学士 (2013.09 - 2017.06)

主修课程

本科: 普通物理学、高等数学、理论力学、热力学与统计物理、量子力学、电动力学、固体物理等。

研究生: 群论、高等量子力学、固体理论、半导体物理、凝聚态物理导论、凝聚态物理研究方法 with 学术道德规范等。

科研情况概述

- **涉及领域:** 第一性原理计算方法和应用, 大规模并行计算软件开发。
- **研究方向:** 实空间第一性原理计算方法和软件的发展及应用。
- **科研成果:**
 1. 开发实空间第一性原理电子结构计算软件 ARES, 实现了非周期边界条件下的电子自洽、能带计算及结构优化, 设计并实现了 ARES 的 k 点、电子态、网格 MPI 并行。
 2. 发展了基于原子位置的实空间网格点截断方法加速自洽求解。
 3. 发展了基于结构对称性的实空间 Poisson 方程加速求解方案。
 4. 基于提出方法和软件, 开展了纳米管材料的电子结构和输运性质计算。
- **科研论文:** 迄今, 一作发表论文 2 篇, 合作论文 3 篇。

专业技能

- **算法实现:** 熟练使用 ScaLAPACK、FFTW 进行本征值问题求解及 CG 迭代法求解线性方程。
- **材料性质研究:** 能熟练使用 VASP、Quantum Espresso、PARSEC、SPARC 等同领域软件计算材料的电子结构, 使用玻尔兹曼输运理论进行输运性质计算;
- **软件开发:** 熟悉 Shell、Python 后处理脚本编写, 熟悉 Linux 环境下的 Fortran 程序开发及 MPI 并行设计与实现。

科研活动

- 2019-2022: 参与 calypso 研讨会并讲解 ARES 使用方法。
- 2023: 参加北京计算物理会议并展示海报。

科研成果

第一作者论文:

- ¹L. Xue(薛岚天), C. Song(宋晨楠), M. Jian(见苗苗), Q. Xu(许强), Y. Fu(付钰豪), P. Gao(高朋越), and Y. Xie(谢禹), “Electronic structure and carrier mobility of bsb nanotubes”, [Chinese Physics B](#) **34**, 037304, 037304 (2025).
- ²L. Xue, Q. Xu, C. Ma, W. Mi, Y. Wang, Y. Xie, and Y. Ma, “Accelerating ab initio real-space electronic structure calculations for low-dimensional materials using an atom-sphere grid truncation method”, [Phys. Rev. B](#) **110**, 155157 (2024).

合作论文:

- ³H. Xiong, C. Qi, L. Xue, L. Zhang, H. Liu, and Z.-A. Qiao, “Solid-state synthesis of mesoporous metals via mechanochemical coordination self-assembly”, [Science China Chemistry](#) **68**, 492–498 (2025).
- ⁴Q. Xu, S. Wang, L. Xue, X. Shao, P. Gao, J. Lv, Y. Wang, and Y. Ma, “Ab initio electronic structure calculations using a real-space chebyshev-filtered subspace iteration method”, [Journal of Physics: Condensed Matter](#) **31**, 455901 (2019).
- ⁵Q. Tong, L. Xue, J. Lv, Y. Wang, and Y. Ma, “Accelerating calypso structure prediction by data-driven learning of a potential energy surface”, [Faraday Discuss.](#) **211**, 31–43 (2018).