

凝聚态物理-北京大学论坛

北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理研究所
2022年第6期 (No. 528 since 2001)

凝聚态体系中由动力学性质描述的状态是相吗？

李新征 教授

时间：3月31日（星期四）13:30—14:30

地点：北京大学物理大楼中212大教室

报告人简介 (Aboutspeaker)：李新征,北京大学物理学院教授。2000年、2003年、2008年分别在武汉大学物理系、中科院半导体所、德国马普学会Fritz-Haber研究所获学士、硕士、博士学位，2008-2011年在伦敦大学学院从事博士后研究，2012年入职北京大学物理学院，2017年完成tenure评估。主要研究方向是凝聚态物理中一些计算方法的发展与应用研究,尤其是与原子核的量子效应相关的计算方法的发展与应用研究。

摘要 (Abstract)：分子动力学模拟的思想最早来自十九世纪下半叶发展起来的热力学理论。自二十世纪五十年代、计算作为手段进入物理学研究后，这一技术开始被人们广泛采用。尤其在上世纪八十年代、第一性原理电子结构计算与其结合后，因对化学键断裂过程on-the-fly的描述能力，分子动力学模拟已成为人们在凝聚体体系中研究相图的一个必不可少的工具。本报告中，我们（叶麒俊、李新征）将针对人们在分子动力学模拟中基于动力学性质描述凝聚态物质存在状态这样一个习惯，开展一些理论层面的讨论。通过在配分函数中引入一个含时项，我们给出了凝聚态物质动力学存在状态的统计描述，基于李-杨零点这一概念将相的定义拓展到动力学相，并应用动力学场这个强度量相对高效地描述出了动力学相之间的转变。在传统的统计语言无法描述的物理问题中（比如玻璃相及其转变、固体的预熔融状态），我们相信这套语言具备一定的应用前景[1, 2]。

参考文献：

[1] Q. J. Ye, L. Zhuang, and X. Z. Li, Dynamic Nature of High-Pressure Ice VII, Phys. Rev. Lett. 126, 185501 (2021)

[2] Q. J. Ye and X. Z. Li, Dynamic phase transition theory, arXiv:2201.08566

邀请人:于彤军 tongjun@pku.edu.cn

http://www.phy.pku.edu.cn/icmp/xsjl/njtwl__bjdxlt.htm