

凝聚态物理-北京大学论坛

2015年第25期 (No.358 since 2001)

<http://www.phy.pku.edu.cn/~icmp/forum/2015/2015qiu.xml>

Probe new crystal structures using static and dynamical simulations

孙建 教授

摘要: Recently, based on the development of accurate theoretical approaches for calculating energies of assemblies of atoms and computing power, together with the progress in searching methodologies, numerous successful predictions have been obtained. In this talk, I will introduce some of our recent work on crystal structure predictions using a static approach, ab initio random structure searching (AIRSS) and dynamical method called ab initio metadynamics. At the end, we will also introduce some results on the vibrational spectroscopy of liquids by ab initio molecular dynamics simulations.

报告人简介: 孙建，南京大学物理学院和固体微结构物理国家重点实验室教授，博士生导师。2002年南京大学物理系本科，2007年南京大学物理系博士。2007-2013年先后在加拿大国家研究委员会、德国波鸿鲁尔大学、英国剑桥大学卡文迪许实验室等地从事博士后研究，2013年受聘于南京大学物理学院。已在国际一流学术刊物上发表SCI论文30余篇，担任Scientific Reports编委成员。曾获加拿大NSERC奖学金、德国洪堡奖学金、中国国家自然科学二等奖（第五完成人）、欧盟玛丽居里奖学金、中组部“青年千人计划”、GRC Alvin Van Valkenburg奖、江苏省杰出青年等荣誉。

时间: 11月26日（星期四）15:00—16:30

地点: 北京大学物理大楼中212教室

联系人: 李新征 研究员 邮箱: xzli@pku.edu.cn

北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理所