

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人： 靳聪明 副教授

(浙江理工大学)

报告题目：

键级势及石墨烯的位错研究

邀请人： 戴小英 研究员

报告时间： 2018 年 7 月 30 日 (周一)

下午 16:00-17:00

报告地点： 数学院南楼九层

902 教室

摘要:

键级势(bond order potential BOP)是由 Pettifor 等提出的基于量子力学计算势能的一种半经验势,是在 Tight-Binding (TB) 基础上建立起来的,兼具第一性原理模拟的准确度和分子模拟的速度,能够反应化学键的变化,而且计算快速准确. 键级势方法广泛的用于各种元素的势能计算中. 报告介绍了键级势的基本原理,采用键级势研究石墨烯,计算了完美石墨烯的势能. 数值实验表明完美石墨烯的确处于平衡状态,受力几乎为零. 另外,报告对石墨烯中的位错进行了初步研究,用 Peierls-Nabarro 模型给出了 Glide 位错和 Shuffle 位错的生成方法,进而用键级势进一步研究石墨烯的位错性质及其运动.

欢迎大家参加!