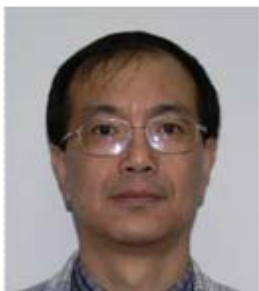




中心系列讲座 ICQM Weekly Seminar Series “寻找更硬更强的轻元素超硬材料”



孙弘 教授
上海交大物理系

Time: 4:00pm, Apr. 13, 2011 (Wednesday)

时间: 2011年4月13日 (周三) 下午4:00

Venue: Room 607, Conference Room A, Science Building 5

地点: 理科五号楼607会议室

Abstract

高性能大规模计算科学随着计算机技术，特别是PC Cluster技术的快速发展，已衍生出计算物理、计算化学和计算材料物理等重要学科。报告首先将简单介绍如何用以密度泛函理论为基础的第一性原理方法计算研究材料的理想强度。然后作为应用，我们将主要介绍超硬材料研究领域以下两个研究方向的最新进展：（1）如何寻找比金刚石更硬更强的新材料；（2）硼元素超硬材料中共价键的“软化”现象。金刚石是地球上目前已知最硬的材料，我们能否寻找或合成比金刚石更硬的材料，这一直是超硬材料研究领域的挑战。超硬材料一般由轻元素（B、C、N）构成，因为这些轻元素原子相互之间形成结合力强、键长短、方向性高的共价键。但我们的计算研究发现有些轻元素原子形成的共价键，如最新发现的硼-相超硬结构中的硼原子共价键，却可以发生明显的软化，其共价键完全失去了强度高、方向性强的基本特征。

About the Speaker

孙弘，上海交通大学物理系教授，1987年上海交通大学物理系获博士学位。1987年至今，上海交通大学物理系任教，1990年破格晋升教授，1994年获博士生导师资格。1993年至1999年，多次赴香港中文大学物理系Yu Kin-Wha教授小组合作访问；2000年至2002年，赴美国加州大学物理系(Berkeley) M. L. Cohen和S. G. Louie教授领导的研究小组合作访问；2004年至2010年，多次赴美国内华达州立大学(Las Vegas)物理系Chen Changfeng教授小组合作访问。目前主要从事第一性原理材料物理的计算研究，主要研究方向是超硬材料强度的第一性原理计算研究等等。