

课题名称

中文：凝聚态物理与计算材料学交叉专业课题：基于蒙特卡洛模拟的分子动力学研究

英文：Introduction to Atomistic Simulations of Materials

课题关键词

材料科学与工程|物理化学|分子动力学|凝聚态物理|计算材料

课程描述

随着科技的不断进步，新材料的发现与设计对于现代社会的发展至关重要。凝聚态物理与计算材料学的交叉研究旨在利用蒙特卡洛模拟和分子动力学方法，揭示材料的微观结构与性质之间的关联，以推动新材料的开发。这一领域的研究将为材料科学和工程领域提供前所未有的机会，加速材料创新，促进能源、电子、生物等领域的进步。

本课程向学生介绍原子尺度下材料基本计算模型的发展。首先，学生将深入了解材料物理背后的基本理论，并通过简短的作业来确保理念的理解。接着，学生将可以选择小组任务，并在团队中合作，开发特定材料过程的更复杂的计算机模型，并撰写详细报告。

导师简介



加州大学洛杉矶分校终身教授

Jaime Marian

- 加州大学洛杉矶分校机械航天工程和材料工程终身教授
- 美国计算机机械工程协会资深科学家
- 美国材料研究学会 (MRS) 核心成员、
- 美国矿物、金属和材料学会 (TMS) 核心成员
- 美国计算力学学会 (USACM) 核心成员

研究方向

课程大纲

- 统计力学与经典力学的基本理论联系
- 分子动力学技术
- 原子间势能
- 蒙特卡罗方法
- 计算实施和编程