

“固体所青联会”第四十九期学术论坛

报告题目： 计算科学在能源材料中的跨尺度模拟

报告人： 张永胜 研究员（固体所）

报告时间： 2016年11月11日上午9:20（周五）

报告地点： 固体所新楼520会议室

主办单位： 中科院固体物理研究所青年联合会

中科院青年创新促进会合肥物质科学研究院小组

报告摘要： 得益于大型计算机的飞速发展以及计算手段的日新月异，计算科学不但可以用来解释实验现象，而且能够先于实验预测出新材料和发现新现象。密度泛函理论（DFT）是能源材料研究中重要的方法，但DFT只适用于微观尺度材料性能的模拟，这和实验以及实际应用的材料之间就存在一个尺度沟壑的问题。本报告将介绍通过结合DFT的精度和热力学统计力学的速度实，实现了在时空领域中的跨尺度模拟，对催化材料表面氧吸附的形貌以及热电材料热导率进行了研究。

个人简介： 张永胜博士于2008年在德国马普协会Fritz-Haber-Institute获得博士学位。先后在Fritz-Haber-Institute和美国西北大学从事科学研究工作。入选第十二批“国家青年千人”，现在中科院合肥物质科学研究院固体所物质科学计算研究室工作。长期以来致力于凝聚态物理以及新型能源材料领域的计算研究工作。主持了国家自然科学基金面上和合肥物质科学技术中心方向项目培育基金科研项目。在Nature, PRL等国际刊物发表SCI学术论文30余篇。