

Seminář odd. 26

Tenkých vrstev a nanostruktur

Fyzikální ústav AVČR, Cukrovarnická 10, Praha 6

datum: 23. 2. 2010 úterý

čas: 10:00

místnost: knihovna, budova A

TÉMA

Simulácia štruktúrnych fázových prechodov v kryštáloch pomocou metadynamiky

Dr. Roman Martoňák

Katedra experimentálnej fyziky FMFI UK Bratislava

V seminári bude prezentovaný algoritmus pre simuláciu štruktúrnych fázových prechodov v kryštáloch založený na metadynamike. Táto technika umožňuje simuláciu komplexných transformácií vrátane rekonštruktívnych fázových prechodov prvého druhu. Budú tiež ukázané aplikácie techniky v kombinácii s ab initio výpočtami na simuláciu viacerých dôležitých systémov. Zameriame sa najmä na skúmanie tlakom indukovaných fázových prechodov v rôznych fázach SiO₂, polymerizáciu molekulárnych kryštálov CO₂, prípravu post-diamantových fáz uhlíka ako aj predpoveď novej fázy vápnika pri vysokom tlaku.