



北京大学应用物理中心 高能量密度物理数值模拟教育部重点实验室 北京大学工学院材料系

题目：Computational Design of New Energy Materials and its Challenges

龚新高 教授

Key Laboratory for Computational Physical Sciences, Department of Physics, Fudan University

报告摘要： With the rapid development of the modern computational techniques, computational studies on the condensed matter, simulating specific dynamics processes and designing desired materials, have played a more and more important role. In this talk, I will take new solar energy materials, a quaternary semiconductor alloy we have worked on for a few years, as an example, to demonstrate the capability of computational designs of materials. I will show, by combining of some basic physical intuition, how we can clarify their structures and electronic properties of complicate quaternary alloys starting with well-known binary alloys, how we can extract the unique physics in such quaternary alloys which is absent in conventional semiconductors. Furthermore, I will present a new algorithm for inverse design with desired properties. Some of new elemental solar energy materials will be discussed. Finally, I will briefly discuss some key challenges in computational design of solar energy materials.

报告人简介：

龚新高，复旦大学谢希德教授、国家杰出青年基金获得者、科技部重大科学研究计划首席科学家、美国物理学会会士。1982年7月大学本科（理学学士）毕业，1985年和1993年分别在中国科学院固体物理研究所获得理学硕士和理学博士。1988年至1991年在意大利国际理论物理中心（ICTP）Research Fellow。1993起在中国科学院固体物理所任研究员，1995年起任中科院固体物理所理论研究室主任，1996年起任博士生导师。2000年调入复旦大学物理系任教授，2005年起任复旦大学特聘教授，2011年起任复旦大学物理系谢希德特聘教授。1999年获得国家杰出青年基金，2006年上海市学术带头人。2009年起任复旦大学物质计算科学教育部重点实验室主任。主要研究方向是计算凝聚态物理，包括理论计算方法发展、纳米结构的计算和模拟、新型能源材料的计算设计等。近期开展了新型太阳吸收材料的理论研究，主要工作集中在成本低环境友好的多元合金半导体，理论预言了新的材料体系，澄清了长期在四元半导体合金的结构和能隙等方面问题，发现了不同于传统少元半导体基本特性，为该类太阳能电池的发展做出了贡献。



主持人：贺贤土 院士

时间：12月16日 下午1:30 -3:0

地点：工学院1号楼210报告厅