

上海硅酸盐所高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室举行RMC材料计算培训

文章来源：上海硅酸盐研究所

发布时间：2014-08-29

【字号：小 中 大】

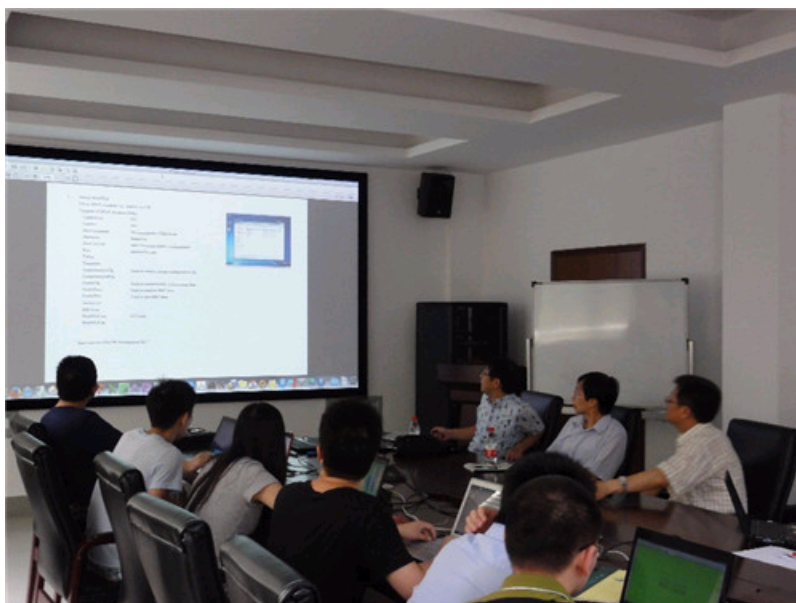
8月25日，应中国科学院上海硅酸盐研究所高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室的邀请，日本高辉度光科学研究所研究员兼日本同步辐射（SPRING-8）高能X射线衍射站的负责人小原真司教授到上海硅酸盐所进行学术交流，以“逆蒙特卡罗模拟计算在材料科学中应用”为主题，进行了为期3天的讲座和培训。本次报告吸引了来自国家重点实验室、结构中心、涂层中心、能源中心等30多位科研人员和研究生热情参与。上海硅酸盐所余建定研究员主持了本次讲座。

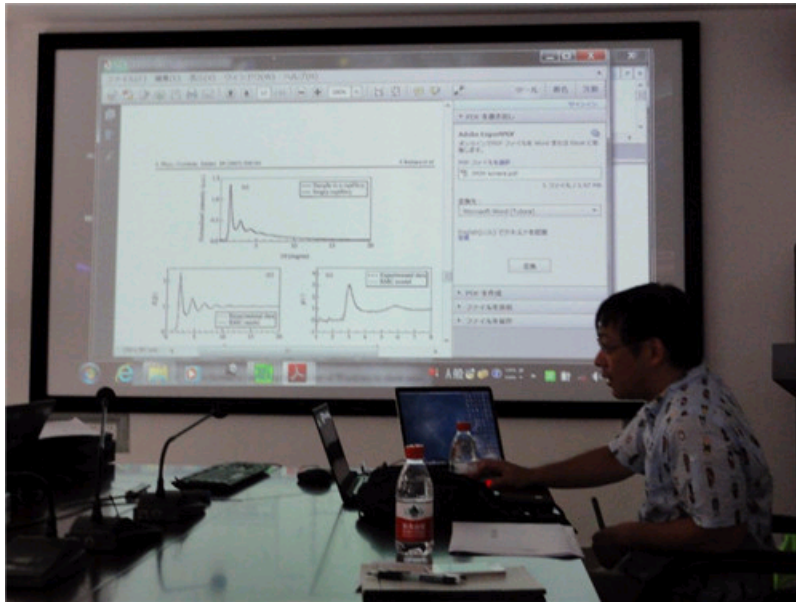
RMC方法以X射线衍射、中子衍射、小角度散射(SANS)和XAFS（边缘X-射线吸收精细结构参数）等实验数据为基础，通过调节计算模型区域原子的随机参数来构建无序结构的三维模型，实现理论计算与实验结果的一致性和可靠性。近年来，RMC方法不断在玻璃体、液体和非晶体等无序体系结构解析方面取得重大进步，更新了人们对非晶体系结构的认识水平。

小原真司教授长期从事陶瓷和玻璃的结构测试、分析和计算，特别是利用逆蒙特卡罗（Reverse Monte Carlo, RMC）方法计算原子内部结构，解析了非晶的原子和电子状态分布结构，取得了一系列令人瞩目的成果，发表在*Science* (303, 1649-1652, 2004)、*Nature Mater.* (10, 129-134, 2011) 等著名期刊上。

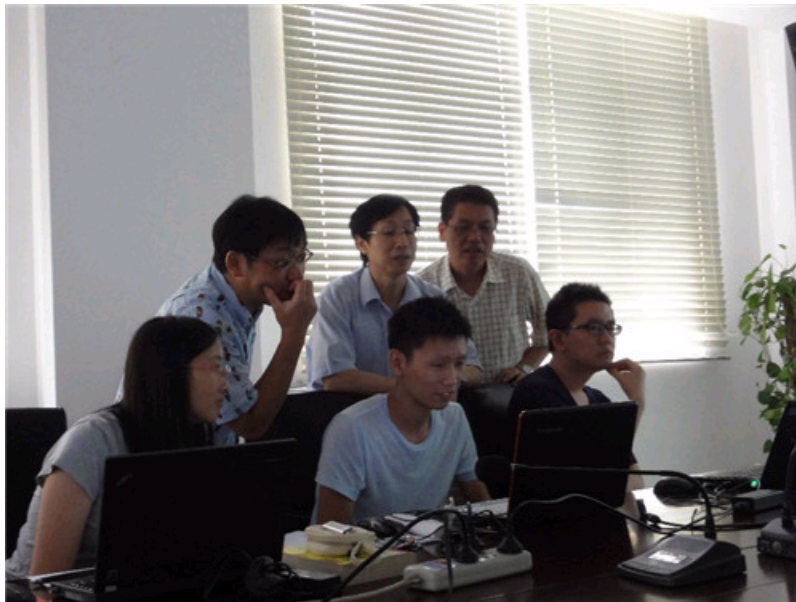
本次报告和培训分3天进行。小原真司教授首先报告了世界第三代同步辐射研究历史进展以及在材料结构解析方面的应用情况，然后从RMC原理、计算方法、实验数据处理以及软件操作方法、结果分析等各个方面做了详细培训，并以液体Hg、SiO₂玻璃和Al₂O₃液体的结构参数计算为例，对参加培训的研究生进行了现场指导。本次培训讲座引起了与会科研人员和研究生对RMC的强烈兴趣，在培训过程中进行了热烈的讨论。通过深入交流，达成在今后科研中充分利用同步辐射、中子衍射资源以及RMC结构计算的共识。

附：相关RMC计算软件放在<ftp://172.20.72.251/Software>下，欢迎大家下载使用。





RMC计算演示



RMC计算现场指导

打印本页

关闭本页