

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 江剑 研究员

( 中国科学院化学所 )

报告题目:

带电体系的局部化蒙特卡洛模拟方法

邀请人: 卢本卓 研究员

报告时间: 2019 年 3 月 13 日 (周三)

上午 10:00-11:00

报告地点: 数学院南楼六层

602 教室

## 摘要:

Maggs 和 Rossetto 于 2002 年提出了一种基于高斯法则、适用于带电体系且计算复杂度为  $O(N)$  的局部化蒙特卡洛模拟方法。该方法包含两个自由度：带电分子的构象和电场。在本报告中，我们将讨论执行该方法中涉及到的两个重要问题：移动带电分子的接受概率问题和相空间中抽样的各态历经问题。提出一种基于电场叠加原理且简单有效的方法改进带电分子移动的接受概率；并且提出一种称之为“开放回路”的电场更新方法，使得相空间中的抽样实现各态历经。应用该改进的分子模拟方法，我们研究了介电非均匀界面对电解质水溶液双电层结构的影响。分子模拟结果跟我们先前的理论工作近乎完美吻合。最后，我们运用该改进的分子模拟方法针对介电非均匀界面对聚电解质吸附性质影响进行了研究，并发现介电非均匀界面（镜像电荷效应）对聚电解质吸附行为有非常重要的影响（发现在介电非均匀性的影响下，聚电解质吸附行为呈现出“一阶相变”的现象）。

## 报告人介绍:

江剑，2014 年 12 月在北京化工大学获得工学博士，博士期间课题主要是围绕经典密度泛函理论在复杂流体体系中的应用，2012 年-2013 年在加州大学河滨分校交流期间主要从事非均匀电解质溶液的热力学性质以及超级电容器充放电的理论研究。2015 年 1 月至 2018 年 11 月，在加州理工学院从事博士后研究工作，研究领域为高分子物理。2018 年 12 月-至今，任中国科学院化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室研究员，主要从事非均匀聚电解质体系的理论与模拟研究。

# 欢迎大家参加！