

凝聚态物理-北京大学论坛

北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理研究所
2020年第13期 (No. 493 since 2001)

凝聚态体系电子结构计算方法的发展与应用

陈基 研究员

时间: 12月31日 (星期四) 15:00—16:30
地点: 北京大学物理大楼中212大教室

报告人简介 (Aboutspeaker) : 陈基, 北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理研究所研究员。2009年本科毕业于中国科学技术大学物理系。2014年于北京大学物理学院获博士学位。2014-2017英国伦敦大学学院博士后。2017-2018德国马克思普朗克固体研究所博士后。主要研究方向为凝聚态物理中的电子结构计算方法的发展与应用。研究方法包括量子蒙特卡洛方法、密度泛函理论、分子动力学模拟等。研究内容主要关注水、氢等轻元素材料, 表面界面体系, 低维纳米材料和材料缺陷等。

摘要 (Abstract) : 电子结构计算是凝聚态物理和材料物理研究的中非常重要的研究手段。基于电子结构计算人们可以进行第一性原理计算, 也可以从电子结构计算获得具体材料的模型参数进行理论分析和数值模拟。目前材料模拟中常用的电子结构计算方法主要包括密度泛函理论、波函数方法以及量子蒙特卡洛方法。本次报告将首先简要介绍一下不同电子结构计算方法的基本原理, 然后介绍我们研究组近期针对水溶液和二氧化钛体系中的若干具有挑战性的理论问题开展的一些初步研究工作。包括 (1) 应用密度泛函理论研究二氧化钛中的极化子与水的相互作用; (2) 结合量子蒙特卡洛和第一性原理计算分子动力学研究氨根离子水溶液; (3) 应用波函数理论和量子蒙特卡洛方法研究二氧化钛中的氧空位缺陷。

邀请人: 于彤军 tongjun@pku.edu.cn

http://www.phy.pku.edu.cn/icmp/xsjl/njtwl__bjdxlt.htm