

凝聚态物理-北京大学论坛

2009年第10期

第一性原理计算及其在凝聚态物质中的应用

方忠 研究员

时间：4月30日（星期四）15:00—16:40

地点：北京大学物理大楼中212教室

<http://www.phy.pku.edu.cn/events/icmp09s>

方忠

1996年获得华中理工大学博士学位。1993-2003年，在日本及美国访问。2003年获得中科院“百人计划”支持，回国到中科院物理研究所工作，任研究员、博士生导师。2005年组建物理研究所“量子模拟科学中心”，担任首任中心主任。2004年获得基金委杰出青年科学基金。2005年入选百千万人才工程国家级人选。2008年作为学术带头人获得基金委创新研究群体资助。2008年获得茅以升青年科技奖。2008年获得国际理论物理中心颁发的ICTP奖。

主要从事计算凝聚态物理方面的研究。主要成果包括：1. 发展了关联电子系统的有效计算方法（例如：LDA+Gutzwiller方法）；2. 阐明了反常Hall效应的物理本质；3. 预言了真实的拓扑绝缘体材料。共发表SCI论文60余篇，其中包括Science文章3篇，Phys. Rev. Lett. 文章14篇，共被他引1300余次。

报告摘要

介绍基于密度泛函理论（DFT）的第一性原理计算的基本原理及其在凝聚态物理和材料计算方面的应用，及目前所广泛使用的局域密度（LDA）近似所存在的问题，特别是为何LDA在关联电子系统中失效。在此基础之上，讨论如何克服LDA中存在的问题，并介绍LDA+Gutzwiller方法的基本原理。过渡金属氧化物是典型的关联电子系统，将简要介绍其复杂性及轨道自由度的重要性，自旋轨道耦合还可能导致拓扑绝缘体的存在。

联系人：俞大鹏教授 电话：62759474 yudp@pku.edu.cn

北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理所