

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

2022年第30期 (No. 552 since 2001)

Many-body electronic structure calculations with auxiliary-field quantum Monte Carlo

马锋杰 研究员

时间: 12月15日 (星期四) 15:00—16:30

腾讯会议: 525-399-613

报告人简介 (About speaker): 马锋杰, 北京师范大学物理学系和高等量子研究中心研究员, 博士生导师; 于2004年和2010年分别在中国科学技术大学和中国科学院理论物理研究所取得学士和博士学位, 2010-2015年在美国威廉玛丽学院物理系从事博士后研究, 2016年加入北京师范大学高等量子研究中心; 主要从事于第一性原理量子蒙特卡罗多体电子结构计算方法的发展和应用、高温超导及拓扑物性等凝聚态物质中新奇量子现象的计算研究, 以第三完成人获得了2019年度国家自然科学二等奖。

摘要 (Abstract): 关联电子材料性质的数值计算和模拟是凝聚态物理领域的一个前沿课题, 其本质涉及基础科学研究领域最艰巨的挑战之一, 即足够精确地求解量子力学中的多体薛定谔方程并且根据电子结构计算结果进行准确的材料性质的预言。目前广泛使用的平均场电子结构计算方法在关联体系中表现出越来越多的局限性。在这个报告中, 我主要介绍一种近年来得到快速发展的多体电子结构计算方法, 即辅助场量子蒙特卡罗方法, 以及其在实际材料体系中的应用。它从基本的量子力学原理出发, 通过随机抽样的方式实现对电子基态波函数的非微扰、无经验参数的直接描述, 进而得到系统精确的各项基态物理量性质, 是目前可以对真实系统, 尤其是关联电子材料, 进行高精度电子结构计算和性质预言的多体数值方法之一。

邀请人: 陈基 ji.chen@pku.edu.cn

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