

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 黎乐民 院士

(北京大学, 北京)

报告题目: 物质电子结构计算的现状
和面临的挑战

邀请人: 陈志明研究员

报告时间: 2010 年 5 月 24 日 (周一)

下午 3: 15~4: 15

报告地点: 科技综合楼三层 311

计算数学所报告厅

摘要: 概述物质电子结构理论计算的现

状、发展趋势和面临的挑战。一、物质科学（物理学、化学、材料科学和生命科学）研究对电子结构计算提出的要求：复杂材料体系特殊性质的阐释和预测；复杂体系状态变化的微观过程动态实时跟踪模拟—归结为对大体系的电子结构及其随时间变化的精确计算。二、当前流行的计算方法和面对的主要困难：从头计算法—单粒子近似和电子相关能的组态叠加与多体微扰理论方法，变分空间完备性问题；密度泛函理论方法，寻找精确交换相关能泛函显示形式的难题；量子蒙特卡罗方法，确定复杂波函数节点超曲面的困难。三、另辟蹊径的探索：二阶约化密度矩阵理论，变分域与 N -可表示性问题；一阶约化密度矩阵泛函方法，单电子能量与按能级分布佯谬；实空间有限元方法，精度问题。结合物质电子结构精确计算面临的挑战，提出一些希望数学家帮助解决的问题。

欢迎大家参加！