

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 刘瑜 博士

(北京应用物理与计算数学研究所)

报告题目:

固体的密度泛函理论计算基础

邀请人: 戴小英 副研究员

报告时间: 2016年12月20日(周二)

下午 15:00-16:00

报告地点: 数学院南楼七层

702 教室

## 摘要:

随着计算机硬件与软件的发展，以密度泛函理论为代表的 $\text{第一性原理}$ 计算开始占据固体电子结构模拟的主导地位。本次报告将会介绍固体的密度泛函理论计算基础，包括以下内容：晶体的基本特征、Bloch 表象和 Wannier 表象、密度泛函理论的基本框架、自旋-轨道耦合效应的低能微扰修正方法、构造具有满足原子和晶格环境对称性 Wannier 函数的方法。

**欢迎大家参加！**