

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人： 高兴誉 副研究员

(北京应用物理与计算数学研究所)

报告题目：

投影缀加波方法的哈密顿算子
实现技术

邀请人： 戴小英 副研究员

报告时间：2016年12月20日(周二)

下午 16:00-17:00

报告地点： 数学院南楼七层

702 教室

摘要:

投影缀加波 (Projected Augmented Wave, PAW) 是密度泛函理论的主流计算方法之一, 本报告主要介绍 PAW 方法哈密顿算子的实现技术, 包括局域势、非局域势、自旋-轨道耦合修正中各类积分的计算方法。

欢迎大家参加!