

# 凝聚态物理-北京大学论坛

2012年第07期 (No. 253 Since 2001)

## 材料性质的全量子模拟：基于第一性原理 电子结构计算的路径积分分子动力学方法及应用

**李新征 研究员**

时间：4月5日（星期四）15:00—16:40

地点：北京大学物理大楼中212教室

**报告摘要：** 有限温度下材料性质的模拟，依据玻恩-奥本海默近似，要求人们对电子结构和原子核的运动分别进行准确的描述。近年来，随着第一性原理电子结构计算方法的发展，电子的量子描述已达到相当的精确度，而与之相应的原子核运动却很大程度停留在经典描述的层次。该处理所带来的一个直接后果是与原子核量子运动相关的量子隧穿、原子核有效势能面的修正、及高压下一些材料相图等基本物理问题不能被解释。在该报告我，我们将重点介绍一个能够克服这些局限的材料性质全量子模拟方法：基于第一性原理计算的路径积分的分子动力学。利用这个方法，我们系统的研究了核量子效应对金属与水的界面、氢键系统的结构、高压下固态氢的相图的影响等基本物理问题。在报告的最后，我们将对该方面的研究在未来几年的发展做一个初步的展望。

**李新征**，1996-2000，武汉大学物理系本科。2000-2003，中科院半导体硕士，研究方向：半导体微结构电子结构和光学性质的计算。导师：夏建白院士。2003-2008，德国马普学会Fritz-Haber研究所博士，研究方向：全电子GW近似方法的发展（参与完成Wien2k中的GW近似部分）。导师：Matthias Scheffler教授。2008-2011，伦敦大学学院，研究方向：路径积分分子动力学方法的发展（参与完成CASTEP中的路径积分分子动力学部分）。导师：Angelos Michaelides教授。2012加入北京大学物理学院凝聚态所理论组。研究方向是路径积分分子动力学方法的发展，及其与准确第一性原理电子结构计算的结合。

联系人：田光善 教授, [tiangs@pku.edu.cn](mailto:tiangs@pku.edu.cn)

北京大学物理学院凝聚态物理与材料物理所