

## A. 课程名称

计算凝聚态物理选讲/Selected Topics in Condensed Matter Physics

清华大学高等研究院-2018 年秋季学期-刘峥

## B. 内容简介

由于研究对象的复杂性,数值计算或模拟在现代凝聚态物理研究中已经成为与实验和理论一样不可或缺的一环。计算大体上居于实验和理论之间,既可以看作是一种计算机实验,又可以看作是一般理论对于具体问题的定量求解。计算因此也发挥着联系实验和理论的桥梁作用,进而反过来解释和指导实验观测,启发和检验顶层理论设计。

作为伴随计算机技术发展而开拓出的一条新的研究途径,计算凝聚态物理研究按逻辑顺序可以划分为以下几个组成部分:

1. 对于感兴趣的凝聚态体系的某类性质建立可以计算的理论模型
2. 发展用于求解理论模型的数值算法
3. 开发计算机程序以实现数值算法
4. 利用计算机程序数值模拟凝聚态体系
5. 对于计算结果的分析、统计及可视化处理。解释实验,理解物理
6. 基于计算结果检验理论模型的正确性或适用性,修正改进理论模型

本课程的课堂讲授环节主要侧重 1 和 6,上机环节则主要针对 4 和 5 方面的能力加以训练。对于 2、3,我们只概述其中的基本思路,比较不同数值算法和程序实现的优缺点,而不涉及细节和具体的编程技巧。一个基本的出发点是:这门课程主要面向计算工具的使用者,而非写作者。因此只要能够获取成熟的算法库或程序包(它们往往凝结了一个专家团队数年甚至数十年的努力),我们就尽可能地利用前人的成果,没有必要自己从头开始编写计算程序。在这样的定位下,我们希望这门课程不仅可以作为计算凝聚态方向研究生的入门引导,也能使实验和理论方向的研究生能比较快的掌握一些实用的计算技能。对于那些有兴趣的高年级本科生,我们希望这门课程可以通过一个独特的视角展示凝聚态物理的整体面貌。

这门课程总体上是在以密度泛函理论为基础的第一性原理计算框架下展开的。我们选取了 9 个具体的材料体系,通过带着学生们一起实际计算这些例子反过来讲解其中蕴含的一般性的物理。涉及的内容既包括如何计算总能、电荷分布、电子结构等固体材料的基本性质,也包括由此衍生出的磁性、超导、拓扑等现代凝聚态物理中的重要课题。我们也会通过展示近年来发展出的与密度泛函理论相结合的一些多体计算方法,对多体微扰、严格对角化、量子蒙特卡洛等重要的强关联计算手段加以介绍。这门课程没有涉及当前该领域最前沿的一些新进展,比如密度矩阵重整化群、张量网络、深度学习,但课程收尾前已经开始由具体材料向有效模型过渡,也许可以为后续课程提供一个起点。

## C. 教学大纲

### I. 基本电子结构 (共 9 学时)

- H<sub>2</sub> 分子：Hartree-Fock 近似, 密度泛函理论, 数值收敛性 (3 学时)
- Si：半导体, 倒空间, 能带, 态密度 (3 学时)
- Al：金属, 费米面, 表面能, 功函数 (3 学时)

### II. 自旋和磁性 (共 6 学时)

- Fe: 自旋极化, 磁序 (3 学时)
- Bi: 自旋轨道耦合, 能带拓扑 (3 学时)

### III. 元激发和线性响应 (共 15 学时)

- AIAs: 静态介电常数, 声子, 热力学性质 (3 学时)
- AIAs: 应力应变, 弹性常数, 压电系数 (3 学时)
- AIAs: 电极化与 Berry 相 (3 学时)
- Al: 电声耦合, 电阻, 常规超导 (3 学时)
- GaAs: 光学性质 (3 学时)

### IV. 电子的关联性质 (共 18 学时)

- Si: 从 Bloch 表象到 Wannier 表象 (2 学时)
- Si: 格林函数, 自能, 无规相近似, GW 修正 (4 学时)
- NiO: 局域电子的库仑相互作用, +U 修正 (3 学时)
- SrVO<sub>3</sub>: Anderson 杂质模型, 动力学平均场, 量子蒙特卡罗初步 (9 学时)