

“材料与能源科学前沿：激发态和动力学”

培训班

培  
训  
手  
册

2024 年 5 月 13 日~14 日

北京



北京计算科学研究中心  
BEIJING COMPUTATIONAL SCIENCE RESEARCH CENTER

## 培训班简介

北京计算科学研究中心（以下简称中心）是隶属于中国工程物理研究院的独立法人单位，是以计算科学为牵引的多学科基础研究机构。中心成立于 2009 年 8 月。中心的定位是开展计算科学研究，促进科技发展，打造一个国际一流的开展计算科学及相关学科交叉研究的综合平台。

中心积极引进高层次人才，努力开展计算科学相关学科的交叉和创新研究，共有七个研究部：物理系统模拟研究部、量子物理与量子信息研究部、材料与能源研究部、复杂系统研究部、应用与计算数学研究部、力学研究部、计算方法研究部。研究领域涵盖了数学、力学、物理学、化学、材料科学、计算机科学等多个基础、前沿领域。中心积极与国内外知名科研机构以合办会议、合带博士后、人员互访等丰富形式开展合作，努力推动学科交叉、加强学术交流。作为一个基础性、跨学科、开放式的综合研究平台，中心将成为中物院在各个研究领域开展创新研究的重要支撑，开展对外科学技术交流合作的桥梁和纽带，高层次人才引进与培养的摇篮，同时填补我国计算科学相关学科交叉研究领域的空白。

“材料与能源科学前沿”培训班是北京计算科学研究中心材料与能源研究部主办的系列培训班，每年选取领域内最新或最热的主题举办一次。2024 年的主题为“激发态与动力学”，定于 2024 年 5 月 13 日-14 日在北京召开。本次培训班作为北京计算科学研究中心材料科学前沿的科学问题系列讲习班，重点关注凝聚态材料中激发态和超快动力学过程的前沿进展，旨在帮助研究人员掌握相关学科的最新研究状况和研究进展，同时加强与中物院内外研究单位和人员的合作交流。（除 5 月 13 日~14 日培训班外，5 月 15 日~16 日为激发态和动力学研讨会，邀请了国内外教授做学术报告，感兴趣的学员亦可参加。）

# 我们诚挚地欢迎

# 各位学员参加本期培训班！

## 培 训 须 知

为方便各位老师和学员的科研工作/学习和生活，现将有关事项提示如下：

一、培训地点：北京计算科学研究中心 一层 第一会议室

（北京市海淀区西北旺东路 10 号院东区 9 号楼）

二、现场报到：

5 月 13 日（星期一）07:30~08:30（一层第一会议室外）

三、正式培训：

2024 年 5 月 13 日~14 日全天（一层第一会议室）

四、用餐时间与地点：

中餐和晚餐均在北京计算科学研究中心 B1 层食堂自助，凭餐券用餐。

五、WI-FI：

账号：csrc\_guest

密码：csrc20150308

### 其他注意事项：

一、培训期间应严格遵守培训纪律，注意人身和财产安全，有事及时与会务组联系（胸牌挂绳为黄色的人员为会务组工作人员）。

二、自觉遵守培训纪律，不迟到、不早退，因故不能参加培训或需提前离会，须告知会务组。（培训期间，中物院院内单位学员需每天签到一次作为考勤记录，全勤则具备证书颁发资格）

三、进入培训会会场前，请自觉关闭手机或调至静音状态，以免影响他人。

四、禁止在公共场所谈论涉密信息。

### 会务组联系方式：

北京计算科学研究中心 冯 怡 18600984303 [fengyi@csrc.ac.cn](mailto:fengyi@csrc.ac.cn)

## 培 训 日 程

2024年5月13日 星期一	
07:30~08:30	现场注册、签到
主持人：高世武	
08:30~08:40	开班仪式，魏苏淮教授致辞
08:40~10:10	李新征（北京大学） 关于原子核的量子效应模拟方法的介绍
10:10~10:40	问答讨论、合影、茶歇
10:40~12:10	任新国（中国科学院物理研究所） 第一性原理计算中的杂化泛函和无规相近似方法介绍
12:10~14:00	问答讨论、午餐（CSRC BI Canteen）
主持人：黄兵	
14:00~15:30	孟胜（中国科学院物理研究所） 阿秒科学与凝聚态物理
15:30~16:00	问答讨论、茶歇
16:00~17:30	张俊（中国科学院半导体研究所） 电声耦合的光学探测和调控
17:30~19:00	问答讨论、晚餐（CSRC BI Canteen）

## 培训日程

2024年5月14日 星期二	
08:15~08:30	签到
主持人：丁子敬	
08:30~10:00	颜世超（上海科技大学） 扫描隧道显微技术及其在量子材料研究中的应用
10:00~10:30	问答讨论、茶歇
10:30~12:00	兰峥岗（华南师范大学） 非绝热分子动力学
12:00~14:00	问答讨论、午餐（CSRC B1 Canteen）
主持人：康俊	
14:00~15:30	任志勇（电子科技大学(深圳)高等研究院） Time-Dependent Density Functional Theory for Open Systems and Its Applications
15:30~16:00	问答讨论、颁发证书、茶歇
16:00~17:30	蒋鸿（北京大学） First-principles approaches to electronic excited states of materials
17:30~19:00	问答讨论、总结闭幕、晚餐（CSRC B1 Canteen）

## 题目：关于原子核的量子效应模拟方法的介绍

### 授课老师：李新征

李新征，北京大学物理学院教授。2000年、2003年、2008年分别在武汉大学物理系、中科院半导体所、德国马普学会Fritz-Haber研究所获学士、硕士、博士学位，2008-2011年在伦敦大学学院从事博士后研究，2012年入职北京大学物理学院，2017年完成tenure评估。主要研究方向是凝聚态物理中一些计算方法（特别是与核量子效应相关的计算方法）的发展与应用研究。近年来主讲《群论 I》、《今日物理》两门课程，并参与《多体系统的量子理论》、《凝聚态物理导论》两门课程的建设。



### 授课内容简介：

在凝聚态体系的物性模拟中，人们一般习惯于基于球-棒模型来描述电子结构与原子核的运动。当原子核本身的量子属性需要考虑时，人们会利用声子，基于简谐或准简谐近似的方法来进行处理。近年来，随着实验上精密测量技术的发展与理论上各种计算方法的进步，超越此理论框架的物理现象与化学过程不断涌入物质科学前沿研究的视野。在该讲座中，我们将重点介绍关于原子核的量子效应的模拟方法，具体包括玻恩-黄展开、路径积分方法、瞬子方法、电-声耦合理论等。基于这些方法，我们可以研究核量子效应对凝聚态体系中的高压相图、氢键网络结构、铁电-顺电相变、以及凝聚态体系的光学性质的影响等物理问题。当量子的原子核遇上量子的电子，凝聚态体系会呈现出一系列亟待我们深入研究的新奇物性。

## 题目：第一性原理计算中的杂化泛函和无规相近似方法介绍

授课老师：任新国

任新国，中科院物理所特聘研究员。2006年于德国奥格斯堡大学获得博士学位。先后在柏林弗里兹-哈伯研究所（2006-2012，博士后）和中国科学技术大学量子信息实验室（2013-2019，特任研究员）工作；2019年11月加入物理所。长期从事第一性原理电子结构方法的发展和程序开发工作。研究领域包括：（1）密度泛函理论，特别是基于无规相近似的先进交换关联泛函方法；（2）格林函数理论，特别是基于GW近似的激发态计算方法；（3）大型第一性原理计算软件的开发。



### 授课内容简介：

密度泛函理论的成功在于人们在该理论框架下发展出了多个不同等级、不同精度的交换关联泛函近似，以满足材料计算领域的不同需求。其中“第四阶泛函”，即广义Kohn-Sham理论框架下的杂化泛函在计算化学领域已经取得了巨大成功，并且近年来在计算材料科学领域中应用也愈加广泛。而“第五阶泛函”中的无规相近似则可以捕捉低阶泛函所不能描述的非局域电子关联效应，且对不同的价键作用都有较为均衡的描述。本报告将介绍杂化泛函和无规相近似背后的思想，并用具体案例阐明它们的优势和缺失。此外还将论及该领域最近的一些进展，并对未来发展前景做一些展望。

## 题目：阿秒科学与凝聚态物理

### 授课老师：孟胜

孟胜，中科院物理所研究员、国科大岗位教授。2000年中国科技大学毕业，2004年获中科院物理所凝聚态物理博士学位、瑞典 Chalmers 理工大学应用物理博士学位。2005-2009年在哈佛大学物理系任博士后和研究助理。2009年7月回国任特聘研究员。现任物理所研究员、课题组长、表面物理国家重点实验室主任。曾获国家杰出青年基金资助，获北京市科技一等奖等。主要研究方向包括：激发态量子动力学；能量转化微观机制；表面量子作用等。在该领域发表论文200余篇，被引用15000余次。



### 授课内容简介：

阿秒激光脉冲的产生和测量技术被授予2023年诺贝尔物理学奖。本报告将回顾阿秒科学的产生和简要发展历程。特别是阿秒脉冲如何帮助我们更好地理解我们身边的物质世界？阿秒脉冲产生之后，真正的阿秒科学才刚刚拉开帷幕。



## 题目：电声耦合的光学探测和调控

授课老师：张俊

张俊，男，中国科学院半导体研究所研究员，中国科学院大学教授。在半导体光学制冷、激子声子耦合、自旋声子耦合等方面做出了一系列原创成果，已在 Nature、Nature Photonics、Nature Communications 等在内的期刊上发表学术论文 120 余篇，被引用 9000 余次，H 因子 46。2015 年入选国家海外高层次人才计划，2018 年获北京市杰青资助，2021 年获纳米研究青年科学家奖。



### 授课内容简介：

声子是固体中晶格振动的元激发，声子与其他自由度的相互作用对材料的电子输运、光学响应、热传导能等方面具有至为重要的影响。随着半器件尺寸降低，声子物理性质和电声子耦合对于器件性能的影响更为显著。在本报告中，主要介绍我们最近在低维半导体声子与电子、缺陷、自旋相互作用的光学探测和调控，包括声子-激子耦合，声子-自旋耦合，声子激光冷却等方面的基本原理、实验方法和最新进展。

## 题目：扫描隧道显微技术及其在量子材料研究中的应用

授课老师：颜世超

颜世超，上海科技大学物质科学与技术学院副教授（tenured）。2012 年在中国科学院物理研究所获得博士学位。读博士期间，曾在美国加州大学尔湾分校交流访问。博士毕业后，先后在德国马克斯普朗克研究所和美国伊利诺伊大学香槟分校物理系做博士后。2017 年加入上海科技大学。曾入选国家高层次人才计划青年项目。主要研究方向是低温强磁场扫描隧道显微学，层状量子材料的物性探测与界面调控，原子尺度自旋动力学等。迄今发表的第一作者/（共同）通讯作者的文章包括 Nature Nanotechnology, Science Advances, Nature Communications, Physical Review Letters (4), Nano Letters (4) 等。



### 授课内容简介：

扫描隧道显微镜（STM）是一种利用量子隧穿效应探测物质表面结构和电子结构的仪器，可以提供表面上原子尺度的结构和电子结构信息。STM 是当前研究量子材料的最关键的实验技术之一，在拓扑量子材料、二维材料、高温超导和强关联电子材料等研究领域发挥着重要的作用。本报告将系统介绍扫描隧道显微镜的工作原理和组成，并通过其在超导材料研究中的应用全面阐述基于扫描隧道显微技术的表征能力。同时会介绍具有自旋和时间分辨的扫描隧道显微技术。在此基础上，报告的第二部分将介绍我们课题组利用扫描隧道显微技术在层状电荷密度波材料体系的物态探测和界面调控方面的研究工作。

## 题目：基于面跳跃算法模拟非绝热分子动力学

### 授课老师：兰峥岗

兰峥岗，华南师范大学环境学院研究员，中国科学技术大学学士（2000），中国科学院化学研究所硕士（2003），德国慕尼黑工业大学博士（2007）。曾先后在德国慕尼黑工业大学(2007-2008)、德国马普学会碳研究所（2008-2009）开展博士后研究。2011年入选中科院“百人计划”，任中国科学院青岛生物能源与过程研究所研究员。2018年9月起加入华南



师范大学。主要研究方向是通过发展理论方法和程序，在分子层面上理解化学、生物、环境和材料的问题，特别关注于光诱导的反应过程。研究聚焦于发展和使用各种理论方法（半经典和量子动力学，激发态电子结构方法等），结合机器学习方法，非线性光谱理论，从各种角度理解各种光诱导过程。在 *J. Phys. Chem. Lett.*, *J. Chem. Theory Comput.*, *J. Chem. Phys.* 等刊物发表 SCI 收录论文 110 多篇。

#### 授课内容简介：

随着原子核的运动发生的电子态之间的跃迁，被称为非绝热过程。该过程广泛存在于多种化学体系中。从理论上理解这一过程极具挑战性，因为该过程中电子和原子核的运动耦合在一起，量子化学的基本假设“波恩-奥本海默近似”被打破。作为一种常见的半经典近似，混合-量子经典动力学是将一部分自由度用牛顿力学处理，另一部分自由度用量子力学处理。基于轨迹的面跳跃动力学，本质是一种混合量子经典动力学，该方法将核和电子分别使用经典和量子处理。考虑核的运动是经典的，用经典轨线在当前所处的势能面上的演化进行描述，而电子运动则用含时的薛定谔方程描述。非绝热跃迁由轨线在不同势能面间的跳跃描述，其跳跃几率和电子演化有关。由于面跳跃动力学的数学处理相对简单，也可以比较好地给出反应通道等信息，因此获得了很大关注。

## 题目：Time-Dependent Density Functional Theory for Open Systems and Its Applications

授课老师：任志勇

任志勇，电子科技大学（深圳）高等研究院教授，2004 年获香港大学博士学位。2013 年入选中组部青年千人计划，同年获得国家优秀青年科学基金项目的资助。主要研究方向包括纳米电子和光电器件的研究；多尺度模拟方法的发展和应用；线性标度量子力学方法的发展和计算机软件的开发。至今已在 Chemical Society Review、Advanced Science、Nano Letters、PRL、JACS 等期刊发表论文 100 余篇。



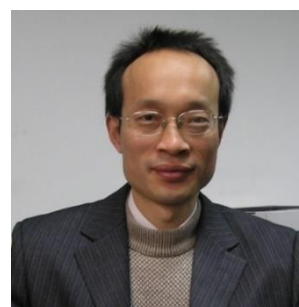
### 授课内容简介：

Photovoltaic devices, electrochemical cells, catalysis processes, light emitting diodes, scanning tunneling microscopes, molecular electronics, and related devices have one thing in common: open quantum systems where energy and matter are not conserved. Understanding the electronic dynamics of these systems is fundamentally important for their applications. Time-dependent density-functional theory (TDDFT) has been successfully applied to predict excited-state properties of isolated and periodic systems. However, it cannot address a system coupled to an environment or whose number of electrons is not conserved. To tackle these problems, TDDFT needs to be extended to accommodate open systems. In this talk, I will introduce a first-principles method to simulate the dynamics of open electronic systems. For its applications, the method is applied to study how quantum interference develops in a molecular transistor in time domain. In organic photovoltaics, the method is employed to simulate in real time and space the generation, migration, and dissociation of electron-hole pairs, transport of electrons and holes.

## 题目：First-principles approaches to electronic excited states of materials

授课老师：蒋鸿

蒋鸿，北京大学化学与分子工程学院研究员，2003年获北京大学物理化学专业理学博士学位。曾先后在美国杜克大学(2003-2004)、德国法兰克福大学(2004-2006)和德国柏林弗里兹-哈勃研究所(2006-2009)开展博士后研究。主要研究兴趣是发展针对材料体系的电子结构理论方法和计算程序，并将其应用于重要新材料的理论研究，在 *Phys. Rev. Lett.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *J. Chem. Phys.*等刊物发表学术论文 120 余篇。现担任 *IOP-Electronic Structure* 和 *Computer Physics Commun.*等刊物编委。



### 授课内容简介：

Electronic excitations in materials play key roles in many important fields of materials science including electronics, photo-electronics, photo-catalysis, photovoltaics, luminescence and so on. First principles treatment of electronic excitations of materials remains a great challenge. In this lecture I will cover three aspects of electronic structure theory of excited states of materials: 1) electronic band structure of materials by Green's function based many-body perturbation theory in the *GW* approximation [1,2], 2) optical absorption properties of materials by *GW* plus Bethe-Salpeter equation (*GW*+*BSE*) method and time-dependent hybrid functional approach [3], and 3) first-principles approaches to luminescent properties of materials with self-trapped exciton (*STE*) characters [4]. It is hoped that this lecture will give an overview of the current status of first-principles approaches to excited states, and motivate further methodological developments in this important frontier of theoretical condensed matter physics.

[1] H. Jiang, P. Blaha, *Phys. Rev. B* 93, 115203 (2016).

[2] H. Jiang, *Phys. Rev. B* 97, 245132(2018).

[3] H.-Y. Sun, S.-X. Li, H. Jiang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 16296-16306 (2021).

[4] H.-Y. Sun, L. Xiong and H. Jiang, *Chem. Phys. Rev.* 4, 031302 (2023).