

## 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-2019 年秋季学期

主讲教师：刘峥 (email: zheng-liu@tsinghua.edu.cn)

助教：梁力 (email: liangl16@mails.tsinghua.edu.cn)

## B. 基本定位

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, 课后作业则主要针对 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。

## C. 内容简介

这门课程总体上是在第一性原理计算的框架下展开的, 但又努力试图突破密度泛函理论的限制, 在更一般的意义上阐释计算中蕴含的物理。课堂讲授的内容很大程度上是针对经典文献的选讲和讨论。我们遴选了从 1989 年起到 2019 年为止的 25 篇文献作为课程的主干脉

络，这其中有 14 篇发表在物理学最负盛名的综述类期刊 *Reviews of Modern Physics* 上，SCI 总引用次数超过 10 万。就个人品味而言，我认为这些论文可以反映本领域过去三十年最重要的成就和人物。再由这些论文中的参考文献延伸出去，学生应该可以从“计算”的视角一窥凝聚态物理的全貌。

课程的另一条脉络基于计算材料领域的著名开源项目 abinit。这个项目汇聚了以欧洲为主多个国家的材料计算研究组，形成了一个活跃的源代码开发社群，并撰写了详尽的上机实验文档。我们从中选择了 13 个具体的上机算例，作为理论讲解的补充，使学生能够学以致用，进而掌握一些未来科研工作中有用的基本技能。

## D. 教学大纲

### I. Elementary electronic structure (共 24 学时)

- An overview of computational condensed matter physics (3 学时)
- A toy model: hydrogen molecule (3 学时)
- Fundamentals of density functional theory (DFT) (3 学时)
- Homogeneous electron gas and quantum Monte Carlo (4 学时)
- Important numerical considerations (4 学时)
- Magnetism in an itinerant picture (3 学时)
- Spin-orbit coupling and pseudopotential (4 学时)

### II. Geometric phase and polarization (共 12 学时)

- Geometric phase and band topology I (3 学时)
- Geometric phase and band topology II (3 学时)
- Wannier function and polarization (3 学时)
- Maximally localized Wannier function (3 学时)

### III. Many-body properties (共 12 学时)

- Density functional perturbation theory (3 学时)
- Electron-phonon coupling (3 学时)
- Constructing Green's functions on top of DFT (3 学时)
- Strong correlation and dynamical mean-field theory (3 学时)

## E. 考核方式

课上会随堂布置 abinit tutorial (<https://docs.abinit.org/tutorial/>) 中的相应内容，请大家课后自行上机练习，学期结束前从中选择 4 次写成详细的实验报告。报告示例参见：<https://www.labxing.com/lab/496/data>。关于 abinit 的安装，参见课程文件-上机手册-软件配置。同学亦可采用自己熟悉的其他程序包完成实验。

## F. 参考文献

1. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A. I. Lichtenstein, First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: The LDA+U method. *Journal of Physics-Condensed Matter* **9**, 767-808 (1997).
2. A. Bansil, H. Lin, T. Das, Colloquium: Topological band theory. *Reviews of Modern Physics* **88**, (2016).
3. S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Giannozzi, Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Reviews of Modern Physics* **73**, 515-562 (2001).
4. T. Fukui, Y. Hatsugai, H. Suzuki, Chern numbers in discretized Brillouin zone: Efficient method of computing (spin) Hall conductances. *Journal of the Physical Society of Japan* **74**, 1674-1677 (2005).
5. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics* **68**, 13-125 (1996).
6. F. Giustino, Electron-phonon interactions from first principles. *Reviews of Modern Physics* **89**, (2017).
7. X. Gonze *et al.*, ABINIT: First-principles approach to material and nanosystem properties. *Computer Physics Communications* **180**, 2582-2615 (2009).
8. X. Gonze *et al.*, Recent developments in the ABINIT software package. *Computer Physics Communications* **205**, 106-131 (2016).
9. E. Gull *et al.*, Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. *Reviews of Modern Physics* **83**, 349-404 (2011).
10. C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter, Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn. *Physical Review B* **58**, 3641-3662 (1998).
11. R. O. Jones, Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. *Reviews of Modern Physics* **87**, 897-923 (2015).
12. R. O. Jones, O. Gunnarsson, THE DENSITY FUNCTIONAL FORMALISM, ITS APPLICATIONS AND PROSPECTS. *Reviews of Modern Physics* **61**, 689-746 (1989).

13. W. Kohn, Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics* **71**, 1253-1266 (1999).
14. G. Kotliar *et al.*, Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Reviews of Modern Physics* **78**, 865-951 (2006).
15. G. Kresse, J. Furthmuller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B* **54**, 11169-11186 (1996).
16. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B* **59**, 1758-1775 (1999).
17. K. Lejaeghere *et al.*, Reproducibility in density functional theory calculations of solids. *Science* **351**, (2016).
18. N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, D. Vanderbilt, Maximally localized Wannier functions: Theory and applications. *Reviews of Modern Physics* **84**, (2012).
19. G. Onida, L. Reining, A. Rubio, Electronic excitations: density-functional versus many-body Green's-function approaches. *Reviews of Modern Physics* **74**, 601-659 (2002).
20. M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, J. D. Joannopoulos, ITERATIVE MINIMIZATION TECHNIQUES FOR ABINITIO TOTAL-ENERGY CALCULATIONS - MOLECULAR-DYNAMICS AND CONJUGATE GRADIENTS. *Reviews of Modern Physics* **64**, 1045-1097 (1992).
21. R. Resta, MACROSCOPIC POLARIZATION IN CRYSTALLINE DIELECTRICS - THE GEOMETRIC PHASE APPROACH. *Reviews of Modern Physics* **66**, 899-915 (1994).
22. F. Tang, H. C. Po, A. Vishwanath, X. G. Wan, Comprehensive search for topological materials using symmetry indicators. *Nature* **566**, 486-+ (2019).
23. M. G. Vergniory *et al.*, A complete catalogue of high-quality topological materials. *Nature* **566**, 480-485 (2019).
24. D. Xiao, M.-C. Chang, Q. Niu, Berry phase effects on electronic properties. *Reviews of Modern Physics* **82**, 1959-2007 (2010).
25. T. Zhang *et al.*, Catalogue of topological electronic materials. *Nature* **566**, 475 (2019).