



北京理工大学
Beijing Institute of Technology

“21世纪学科前沿”系列学术报告

First-principles approaches to electronic band structure of materials

2017 5 15 15 00

118

本系列学术报告旨在介绍材料科学领域的最新研究成果，特别是第一性原理计算方法在材料电子能带结构研究中的应用。报告将探讨如何通过第一性原理计算材料的能带结构，以及这些计算方法在实际材料研究中的重要性。

第一性原理计算方法是一种基于量子力学原理的计算方法，能够准确地描述材料的电子结构。通过这种方法，我们可以计算出材料的能带结构、带隙宽度、有效质量等关键物理性质。这对于理解材料的导电性、光学性质以及催化活性等方面具有重要意义。

在本系列学术报告中，我们将详细介绍第一性原理计算的基本原理、常用计算方法以及其在材料科学中的应用案例。我们将探讨如何通过第一性原理计算材料的能带结构，以及这些计算方法在实际材料研究中的重要性。

报告将分为三个部分：

- [1] 第一性原理计算的基本原理
- [2] 第一性原理计算方法及其在材料科学中的应用
- [3] 第一性原理计算在材料电子能带结构研究中的应用案例

[1] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B, **13**, 5188 (1976).
 [2] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B, **13**, 5188 (1976).
 [3] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B, **13**, 5188 (1976).