



## Academic Presentations in Physics

# 物理学系列学术报告

报告题目: Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) Meets Excitons in Solids

报告人: 孙久雨 副教授

报告时间: 2023 年 9 月 18 日 (周一) 10:00

报告地点: 物理学院 856

### 报告摘要:

光与物质相互作用是凝聚态物理中最重要的研究领域之一。材料受到光激发后产生的激发态电子和空穴会由于库伦作用形成准粒子——激子。激子效应广泛存在于半导体和绝缘体中,并深刻影响着材料的光吸收性质和光生电荷运动。目前,激子效应第一性原理计算的黄金标准 (golden standard) 是基于多体格林函数理论的GW近似+Bethe-Salpeter方程 (BSE)。然而,由于GW+BSE方法需要花费巨大计算量,严重限制了其在材料模拟与设计更广泛的应用。因此发展描述激子效应的廉价替代方法一直受到理论研究界的关注。含时密度泛函理论 (TDDFT) 是将基态DFT扩展到含时情况,理论上只要能提供正确的交换关联泛函,即能够以低廉的计算代价对体系激发态进行准确描述。目前,虽然TDDFT方法在分子体系激发态中有着广泛的应用,但是在描述周期性体系中激子效应时仍然面临巨大挑战。如何确定合适的交换关联泛函形式是目前研究中的关键问题。本报告将首先简单介绍GW+BSE方法以及利用其研究一些低维体系中激子性质的成功案例。然后讨论TDDFT方法对于描述周期性体系激子的困难和进展,并介绍我们针对上述关键问题提出的杂化TDDFT及其应用。最后介绍我们在real-time TDDFT框架下关于激子动力学方法的重要成果,通过引入一个长程校正的交换关联矢量势,从而以 (real-time) 局域密度近似 (LDA) 的计算代价对激子效应进行半经验描述,有望广泛应用于超快动力学理论模拟中。

### 报告人简介:

孙久雨, 2012 年本科毕业于西北大学物理学基地班, 2018 年 6 月于中国科学技术大学微尺度物质科学国家研究中心获得凝聚态物理学博士学位, 先后在美国密苏里大学、德国马克斯-普朗克物质结构与动力学研究所做博士后研究工作。入选 2022 年国家级海外高层次人才引进计划 (青年项目), 于 2023 年起任南京理工大学副教授。长期致力于周期性体系电子激发态第一性原理方法的发展与应用研究, 并取得了一系列标志性的成果。近五年以第一作者在 PRL、PR research 等刊物发表多篇学术论文。

物理学院、物理所、光子所