

数学与系统科学研究院
计算数学所定期学术报告

报告人: **Prof. Ai-hui Zhou**

(*LSEC, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Academy of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences*)

报告题目:

电子密度泛函模型的数学理解
与数值逼近

报告时间: **2013 年 12 月 26 日 (周四)**

下午 16: 00~17: 00

(15: 30~16: 00 茶歇)

报告地点: **科技综合楼三层 311**

计算数学所报告厅

摘要:

密度泛函理论有十分广泛的适应性, 在计算凝聚态物理、计算材料科学、量子化学、量子生物学和许多工业技术部门得到了成功的应用. 其主要创立者 Walter Kohn 因此和 John Pople 获得 1998 年 Nobel 化学奖. 但一直未见密度泛函模型的理论基础——Hohenberg-Kohn 定理的严格的数学证明, 而模型的数值逼近性也只是近年才得到人们的关注. 本报告将介绍 Hohenberg-Kohn 定理的严格的数学证明以及密度泛函模型的数值逼近最新进展。

欢迎大家参加!