

# 数学与系统科学研究院

## 计算数学所定期学术报告

**报告人:** Associate Prof. Xiao-ying Dai

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

**报告题目:**

电子结构实空间计算简介

**报告时间:** 2014 年 11 月 6 日 (周四)

下午 16: 00~17: 00

**报告地点:** 数学院南楼二层

202 会议室

## 摘要：

物质微观结构模拟已成为当今国际研究热点。第一原理计算是进行这类探索与研究不可或缺的手段。在基于密度泛函理论的第一原理计算框架下，体系电子结构计算归结为 Kohn-Sham 方程的求解。本报告中我将对电子结构实空间计算进行简单介绍，包括已有研究工作、存在的困难与挑战、以及我们的一些最新进展。

**欢迎大家参加！**