

致理书院暑期基础学科交叉实践课程项目申请表

姓 名	徐勇	性别	男	院系	物理系	工作证号	2015990035
最高学位	博士	专业方向	凝聚态物理		职称	教授	
主要科研方向 和成果	主讲教师徐勇，现任清华大学物理系长聘教授、日本理化学研究所兼职研究员。主要研究方向为理论和计算凝聚态物理、拓扑量子物态、第一性原理、人工智能驱动的科学发现。曾获德国洪堡奖学金、清华大学学术新人奖，入选国家青年海外高层次人才引进计划，并获国家杰出青年科学基金资助。						
课程题目	量子材料的第一性原理计算						
教学团队介绍 (请附上团队每位老师照片)	主讲教师 						

课程对学生的先修要求	1. 有《量子力学》基础（可自学）。 2. 有《固体物理》基础（主要涉及能带理论，可自学）。 3. 建议提前了解深度学习、第一性原理计算。
课程设计	包括但不限于以下方面： 容纳人数：15 人 教学资源或设备：学生自带电脑，教师提供 CPU/GPU 高性能计算服务器 课时安排：2 学分 目标和特色：第一原理计算无需任何经验参数，从量子力学的基本原理和方程出发对材料的基本物性作预测，是科学探索不可或缺的研究手段，在新物理和新材料研究中发挥了重要作用。以拓扑量子材料研究为例，绝大部分拓扑量子材料是由第一性原理计算首先预测，再经实验证实而被发现。第一性原理计算已广泛应用于物理、化学、材料、生物等众多研究领域。 本课程将从量子力学出发，介绍第一性原理计算的基本理论、数值实现、材料预测，并将安排上机实习。有科研兴趣的同学将有机会进入实验室参与前沿科学研究。例如，将最新最前沿的深度学习方法应用于第一性原理计算方法发展，突破科学计算的瓶颈问题；将第一性原理计算方法应用于前沿的物理和材料研究，解决关键的科学问题。 近期代表性工作（主要由本科生、低年级研究生完成）： https://www.tsinghua.edu.cn/info/1175/96043.htm https://www.tsinghua.edu.cn/info/1175/103950.htm https://www.tsinghua.edu.cn/info/1175/104446.htm

课程方案	➤ 教学大纲： 1. General introduction 2. Basics of electronic structure theory 3. Band theory and tight-binding method 4. Basics of density functional theory (DFT) 5. Kohn-Sham DFT and its numerical implementation 6. Practice of first-principles material simulation 7. Exchange correlation functionals of DFT 8. First-principles study of Berry-phase physics and topological materials 9. Deep learning and development of first-principles methods
------	---