

综述

GW方法: 基本原理, 最新进展及其在d-和f-电子体系中的应用

蒋鸿

北京大学化学与分子工程学院理论与计算化学研究所, 稀土材料化学及应用国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京 100871

摘要:

基于格林函数的多体微扰理论提供了描述材料基态和激发态性质的一个严格理论框架. 格林函数依赖于交换关联自能, 后者满足一组复杂的被称为Hedin方程的积分微分方程. GW方法是由对自能算符根据屏蔽库仑作用做多体微扰理论展开到第一项得到, 是目前描述扩展体系准粒子电子激发性质最为准确的第一原理方法. 本文概述了GW方法的基本原理, 并对最新的理论方法进展在一个统一的框架下进行了评述. 最后, 通过对若干典型实例的分析展示了针对d/f-电子体系的GW方法的现状.

关键词: 多体微扰理论 GW近似 准粒子电子结构 d/f-电子体系 强关联电子体系

收稿日期 2009-11-30 修回日期 2010-01-19 网络版发布日期 2010-02-23

通讯作者: 蒋鸿 Email: h.jiang@pku.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1408KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友
加入我的书架
加入引用管理器
引用本文

Email Alert
文章反馈
浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 多体微扰理论
▶ GW近似
▶ 准粒子电子结构
▶ d/f-电子体系
▶ 强关联电子体系

本文作者相关文章

▶ 蒋鸿