

# 密度泛函理论中交换关联势的表征

刘峰, 王自强

中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 北京 100190



王自强, 中国科学院院士, 中国科学院力学研究所。长期从事固体力学方面的科研工作, 在弹性稳定理论、断裂力学、塑性应变梯度理论、细观力学等方面作了系统的创造性研究, 取得了有国际影响的突出成果。在对裂纹尖端弹塑性场和断裂准则的研究中, 建立了裂纹顶端弹塑性高阶场和 J-K 断裂准则, 求得了异质界面裂纹顶端弹塑性奇性场; 在应变梯度理论研究中, 发现高阶应力导致数值分析困难和复杂的额外边界条件, 提出了一种新的不含高阶应力的应变梯度理论。曾获国家自然科学二、三等奖, 国家科技进步特等奖等多项奖励。发表学术论著 191 篇(册)。SCI 收录 101 篇, EI 收录 90 篇, 其中 79 篇, 美国科学引文索引(SCI)记载了他引 735 次。

通常交换关联泛函是由实验数据或者模型的数值结果拟合得到, 这里我们通过求解总能方程首次得到了交换关联泛函的公式。一方面, 在均匀电子气极限情况下, 我们的交换关联泛函准确地回归到凝胶模型的 Perdew-Zunger 参数化的结果。另一方面, 利用到总能方程的特解, 我们的交换关联泛函将可以考虑电子密度非均匀的情况。铝和硅两种材料的能带、平衡晶格常数以及体模量的计算证实我们提出的交换关联泛函可以更好地描述材料的性质。本文得到的交换关联泛函公式为密度泛函理论的进一步发展提供了一个新思路。