



材料与物理学院
SCHOOL OF MATERIALS SCIENCE AND PHYSICS

材料与物理学院学术讲座

报告题目：大尺度材料和器件全量子模拟：机器学习和模型降阶方法

报告时间：2026年4月23日（周四）下午 14:00

报告地点：理科楼 A504-1 会议室

报告人：柯友启 研究员 上海科技大学

报告人简介：上海科技大学物质科学与技术学院，长聘

副教授，研究员，入选国家级人才项目。2011年在加拿大麦吉尔大学获得博士学位，之后在美国普林斯顿大学从事博士后研究工作。2014年9月加入上海科技大学。柯友启博士主要从事第一性原理材料和器件仿真方法的研究，主要包括：密度泛函理论方法，非平衡态格林函数方法，处理无序的自洽平均场方法，机器学习方法，模型降阶方法，屏蔽球面波方法，以及他们的结合来实现真实大尺度材料和器件的仿真。目前，课题组独立自主开发了基于屏蔽球面波的第一性原理材料和器件模拟软件包：HOPES。近年来在《PRL》、《PRB》等物理期刊上发表理论文章40余篇。



报告摘要：大尺度材料和器件的全量子模拟是连接原子尺度物理原理与宏观性能的关键桥梁。为实现包含数十万乃至上百万原子复杂体系的电子结构及量子输运性质的高效高精度模拟，本报告介绍两类核心方法：面向电子结构的机器学习方法与面向计算加速的模型降阶方法。具体包括：(I) 发展具有第一性原理精度的机器学习差分电荷密度方法 (DeltaChargeNet)，并与全势能紧束缚 Muffin-Tin 轨道方法结合，实现复杂大尺度器件结构的全量子仿真；(II) 发展高性能线性标度染色叠加态方法，用于加速 Kohn-Sham 密度矩阵的求解。该方法的效率较现有最优线性标度算法提升超过一个数量级，可在较少计算资源下实现百万原子级以上材料系统的高效准确电子结构计算；(III) 发展蒙特卡洛量子输运计算方法，即随机非平衡态格林函数方法，用于加速大尺度器件的量子输运模拟。

主办单位：材料与物理学院

欢迎广大师生参加！