

摘要

随着实验手段的进步，人们在越来越多的无公度体系中观察到了许多新奇的物态和现象，例如魔角转角石墨烯中的超导现象和关联绝缘态，以及冷原子中的量子多体效应。对这些无公度体系的理论研究可以帮助我们更好地理解强关联物理，同时促进量子模拟、新型器件的发展。本报告中，我将介绍我们近年来发展的针对无公度体系量子本征值问题的平面波模型，及其它相关成果。在基础模型下，基于平面波离散，我们可以得到类似 Bloch 定理的矩阵和解的形式。但无公度特有的遍历性会带来和周期体系许多本质性的不同。通过一些一维、二维无公度体系的数值研究，我还将介绍对无公度体系中局域化的一些探索和认识。另外，为了使我们的模型能够处理真实的转角二维材料体系的电子结构计算，我们对原始模型做了一定的拓展，并建立了与遍历性相容的近似能带理论。在数值算例中，我们重现了著名的平带结构，并且它们的关键特征与其它理论计算以及实验测量定量吻合。最后，非线性项，比如 Hartree 能和交换关联能也能够较容易地加入我们的框架中，因此在不远的未来我们可以期待更准确、更高效的无公度体系 DFT 计算模型。