# 复杂材料和生化系统中的跨尺度模型与算法

江天舒

电-磁-光场与物质的相互作用有着十分丰富的物理内涵和广阔的应用前景. 粗略地说，描述电磁特性有三个层次的物理模型: 1）全量子模型：量子电动力学(QED)和量子色动力学(QCD)，如物质(或粒子)采用二次量子化模型，电磁场采用量子化模型，全量子理论是一个比较精确的理论，但对于大尺度材料体系进行全量子模拟将十分困难. 2）半经典理论：对电-磁-光场量子化，而对物质场则采用经典模型，由于它忽略了物质的量子特性，当研究纳米材料和半导体器件的量子效应时，很少采用这一理论. 3）半量子化理论：电-磁-光场采用经典模型，而物质场用量子化模型，如 Maxwell-Schr\"{o}dinger 系统和 Maxwell-Dirac 系统等，相对于全量子理论它简单得多，目前它在研究纳米材料和量子器件电-磁-光特性时被广泛采用.

本文基于半量子化理论，研究量子力学第一性原理的密度泛函理论(DFT)与宏观静电学Poisson方程和经典电磁学Maxwell方程组耦合系统的跨尺度算法及相关数学理论，并应用于新型半导体材料石墨烯的电-磁-光特性分析和尿素分子的反应自由能对于外加电磁场的响应等.

第 1 章引言部分，我们简要介绍了如下内容：1）与本文有关的Kohn-Sham方程的理论、算法和计算软件；2）求解有界和无界区域上具有周期间断系数时谐、含时Maxwell方程组均匀化和多尺度方法的相关工作、发展动态和存在的问题；3）求解在有效质量近似下的微观Schr\"{o}dinger 方程与宏观静电学Poisson方程和经典电磁学Maxwell方程组耦合系统的均匀化和多尺度算法及相关工作.

第 2 章先介绍凝聚态物理学中量子几何相位（特别是Berry相位）、Wannier函数和量子力学局域性“近视原理”等内容；我们基于有效质量近似理论，给出了量子力学局域性“近视原理”的数学证明；针对带有缺陷和掺杂的单层石墨烯材料体系，利用第一性原理计算软件CP2K从数值上验证了近视原理的正确性，数值计算结果表明：缺陷或掺杂对于量子系统电荷密度的影响是局域的，对于石墨烯材料影响在4--5层原子左右. 当然对于不同的材料体系这一影响衰减的速率是不一样的，已有的理论结果表明：对于金属和陈氏(Chern)拓扑绝缘体按幂函数率衰减，而对于有带隙的非陈氏(Chern)拓扑绝缘体按指数率衰减.

第 3 章研究在外加静电场下量子体系平衡态的渐近行为和演化规律，我们证明了在依赖于小参数$\varepsilon$外部电势场作用下，当$\varepsilon\rightarrow 0$ 时，Kohn-Sham方程基态解的收敛性，包括能量和波函数的收敛性. 针对有界区域上具有周期间断系数的Poisson方程和量子力学Kohn-Sham方程非线性耦合系统，提出了跨尺度算法，并实现了单层、双层和三层以及带点缺陷和掺杂的石墨烯材料体系在外加静电势下的能带结构和能隙打开的跨尺度计算,与已有的部分实验和数值计算比较是相吻合的.

第 4 章针对有界区域上具有周期间断系数时谐Maxwell方程组，我们分别基于电偶极子近似的框架，提出了Maxwell方程组与Kohn-Sham方程非线性耦合体系的跨尺度算法，并实现了单层、双层和三层以及带点缺陷和掺杂的石墨烯材料体系在外加时谐电磁场下的能带结构和能隙打开的跨尺度计算，得到了一些与实验结果相吻合的计算结果.

第 5 章初步提出了QM/MM/Poisson耦合模型，针对尿素分子与中性水溶液的静电相互作用，实现了QM/MM/Poisson跨尺度计算，得到了在不同外部势能影响下溶液体系自由能曲面的演化规律，以及

外加静电势对尿素分子化学反应的影响，得到了和文献中相近的势垒. 我们还考虑了在蛋白质溶液环境中，尿素分子的反应自由能势垒的变化.

最后给出结论和展望.

关键词：多尺度模拟，量子力学，密度泛函理论，静电场，电磁场，石墨烯，生化反应