

# 第一原理电子结构计算研究: 数值分析与数值模拟

何连花

## 摘要

本文主要围绕基于密度泛函理论的第一原理电子结构计算研究展开工作, 包括数值分析与数值模拟. 在数值分析方面, 为研究电子结构中一类非线性特征值问题自适应有限元算法的收敛性和复杂度, 我们首先研究了一类二阶椭圆问题自适应有限元算法的收敛性和复杂度, 并且将我们的理论运用到三类典型问题: 非对称边值问题、非线性边值问题和带无界系数的线性特征值问题. 利用类似的方法, 我们分析了重特征值情形的自适应有限元算法的收敛率和复杂度. 然后我们分别研究了由无轨道模型和 Kohn-Sham 模型导出的非线性特征值问题的有限维逼近. 对无轨道模型导出的非线性特征值问题, 我们证明了基态解有限元逼近的收敛率, 设计了相应的自适应有限元算法, 并分析了该算法的收敛率与复杂度. 对 Kohn-Sham 方程我们在局部同构的假设下获得了有限维逼近解的收敛率. 在数值模拟方面, 我们围绕电子结构第一原理并行计算软件包 ABINIT 展开工作. 我们参与了 ABINIT 的有关开发工作, 实现了 ABINIT 与交换关联泛函库 LIBXC 之间的接口, 使得 ABINIT 可以用不同的交换关联泛函进行计算. 进而我们利用 ABINIT 计算了多种材料的平衡结构、晶格动力学、热力学性质等, 比较了不同交换关联泛函对这些物理量的影响. 我们还利用 ABINIT 研究了金链的稳定情况, 计算了线性链、锯齿链、二聚体链、三聚体链以及四聚体链在不同应变下的结构变量、能量和力学性质, 特别地我们分析了线性链、锯齿链以及二聚体链的声子不稳定性.

**关键词:** 电子结构, 密度泛函理论, 先验误差估计, 自适应算法, 交换关联泛函.