第一原理计算研究:
双尺度有限元组合离散与理想强度分析

刘 芳

摘 要

本文研究的是第一原理计算, 包括 Kohn-Sham 方程的双尺度有限元组合离散以及石墨片理想强度的分析. 首先, 本文研究了电子结构计算中的一类重要方程 —-Kohn-Sham 方程的有限元数值求解方法. 求解 Kohn-Sham 方程就是求解一类非线性本征值问题. 为此, 我们讨论了一类求解线性和非线性椭圆边值问题的双尺度有限元组合离散方法, 进而设计并分析了一类求解线性椭圆本征值问题的双尺度有限元组合离散方法. 根据这些理论分析, 构造了求解 Kohn-Sham 方程的双尺度有限元算法并成功地将之应用于量子化学计算中. 双尺度有限元离散方法与传统有限元方法相比, 在同等精度条件下, 节省自由度, 降低计算量. 特别是, 它是一种并行计算格式. 其次, 我们采用第一原理计算软件包 ABINIT, 运用平面波赝势方法和密度泛函微扰理论计算得到了石墨片的理想强度. 这是目前唯一的采用第一原理声子谱的分析方法来确定石墨片理想强度的工作.

关键词: 第一原理方法、密度泛函理论、有限元方法、双尺度离散、理想强度、平面波赝势方法.