

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

# 材料模拟软件与方法简介 (I)

北京市计算中心 云平台事业部 姜骏

E-mail: [jiangjun@bcc.ac.cn](mailto:jiangjun@bcc.ac.cn)

北京科技大学

2024.03.28

# Outline

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

## 1 从理论到计算软件: 以 DFT 为例

- 密度泛函理论
- 从理论到软件的实现
- $\vec{k}$  空间布点与积分
- 计算方法与软件分类

## 2 软件解方程: 迭代与优化

### 3 计算示例: VASP

#### 4 VASP 计算示例

- Si 的电子结构: 态密度与能带

## 5 材料模拟基础: 建模——以 Materials Studio 为例

- Materials Studio 的界面框架
- Materials Studio: Quick Start
- Materials Studio: Calculation

# I Have A Dream

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
F 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

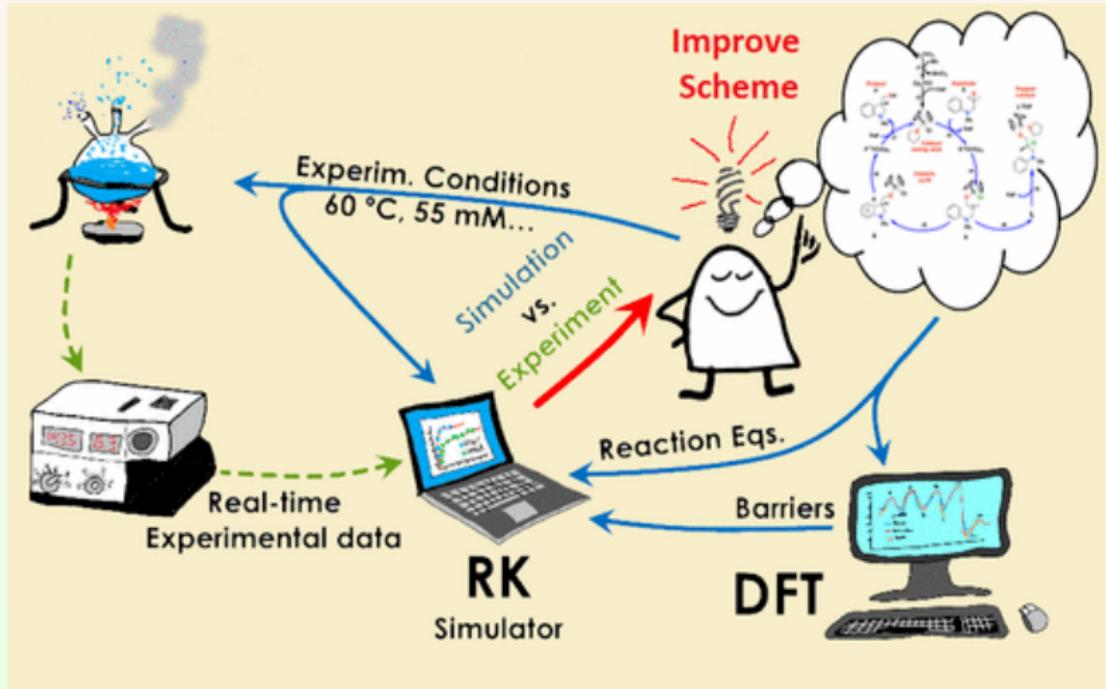
软件解方  
程: 迭代与优化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例



# 材料模拟的基本思想和方法

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

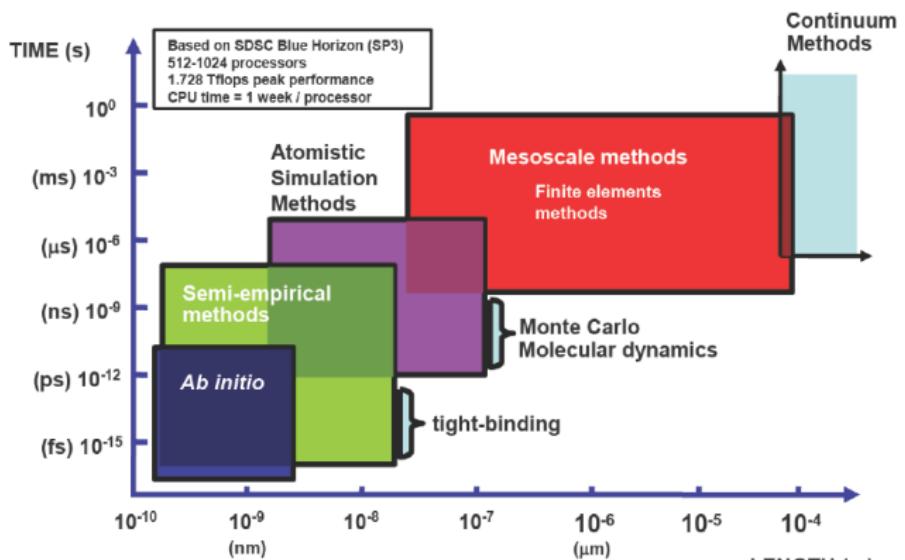
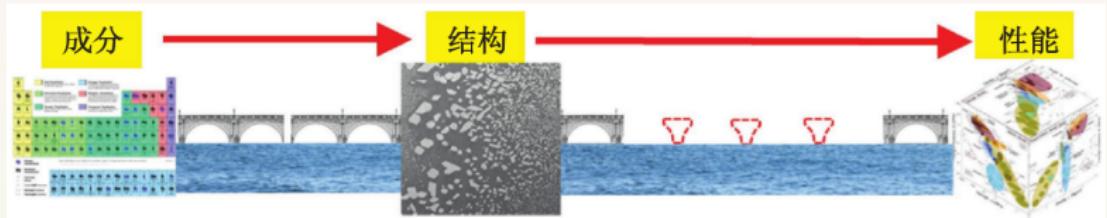
软件解方  
程: 迭代与优化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例



## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
及 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

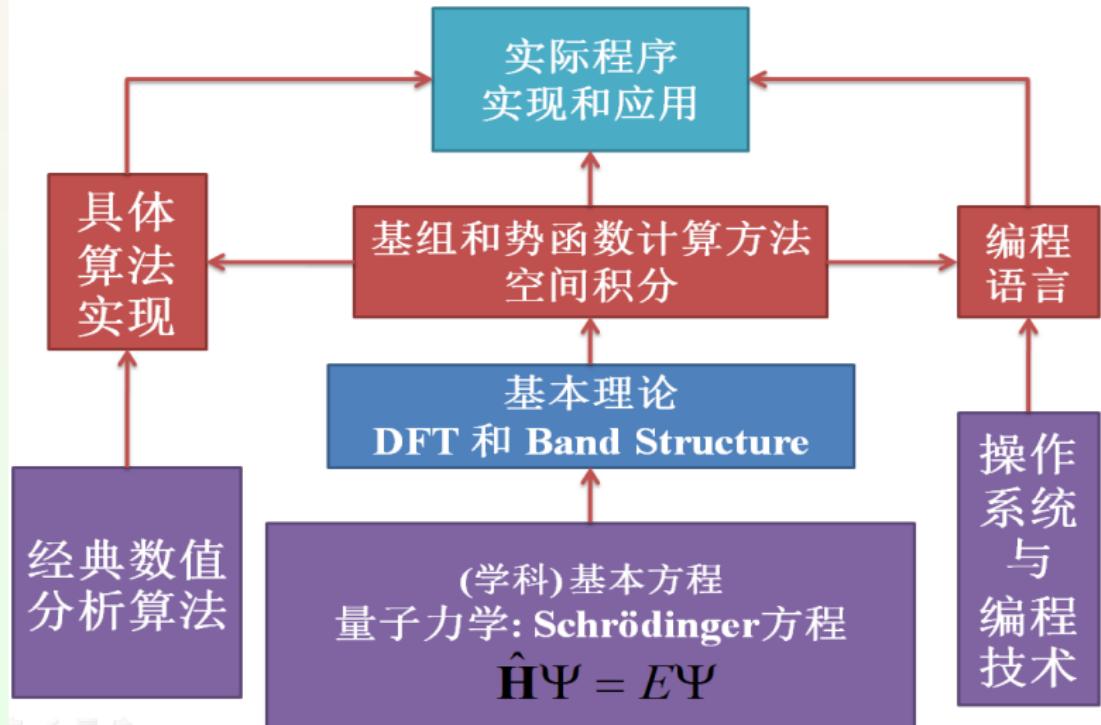
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



# *ab initio* 和 first principle

- *ab initio* 是拉丁文词汇 (Latin term), 其含义是“from the beginning”, 由拉丁文 *ab* (“from”)+*initio* (“beginning”) 合成, 后者是 *initium* 的单数夺格<sup>1</sup>
- *ab initio* 常用于法律和科学领域, 如从头计算法 (*ab initio* method)。法律中, *ab initio* 表示“一开始即如此, 而非法院宣判之后”。
- first principle 指从基本的物理学定律出发, 不外加假设与经验拟合的推导与计算。
- 在物理学领域, first principle(第一性原理) 和 *ab initio*(从头计算) 含义上是等价的。例如利用 Schrödinger 方程在一些近似条件下求解电子结构, 但无须依赖实验数据得到拟合参数的方法, 就是第一原理或从头计算法。

<sup>1</sup> 夺格 (ablative), 又称离格或从格, 语法功能上表示某些词汇的状语。拉丁文 *initium* 的意思是“开始, 初始”。© ⓘ ⓘ ⓘ

# *ab initio* in inscription

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



MEMOR  
ESTO  
CONGREGATIONIS  
TVÆ  
QVAM  
POSSEDISTI  
ABINITIO



The inscription in English:

Mind the congregation  
that has been yours  
since the beginning

# 电荷密度代替电子

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例

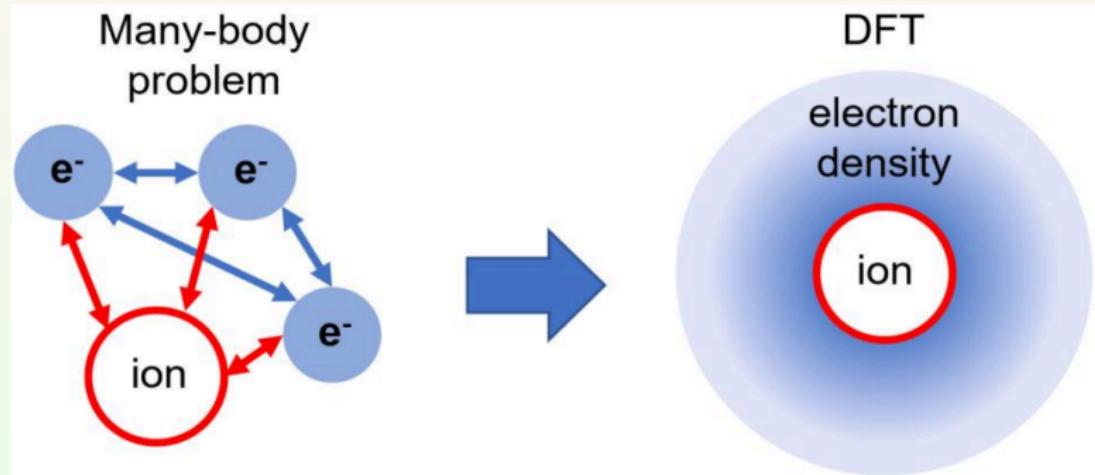


Fig.: Schematic illustration of transforming many-electron system to electron density.

# Creators of DFT

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



**Fig.:** Creators of DFT. Walter Kohn(left, in 1962) and his two postdoctoral fellows, Pierre Hohenberg (middle, in 1965) and Lujeu Sham (right).

# Kohn-Sham 方程

材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例

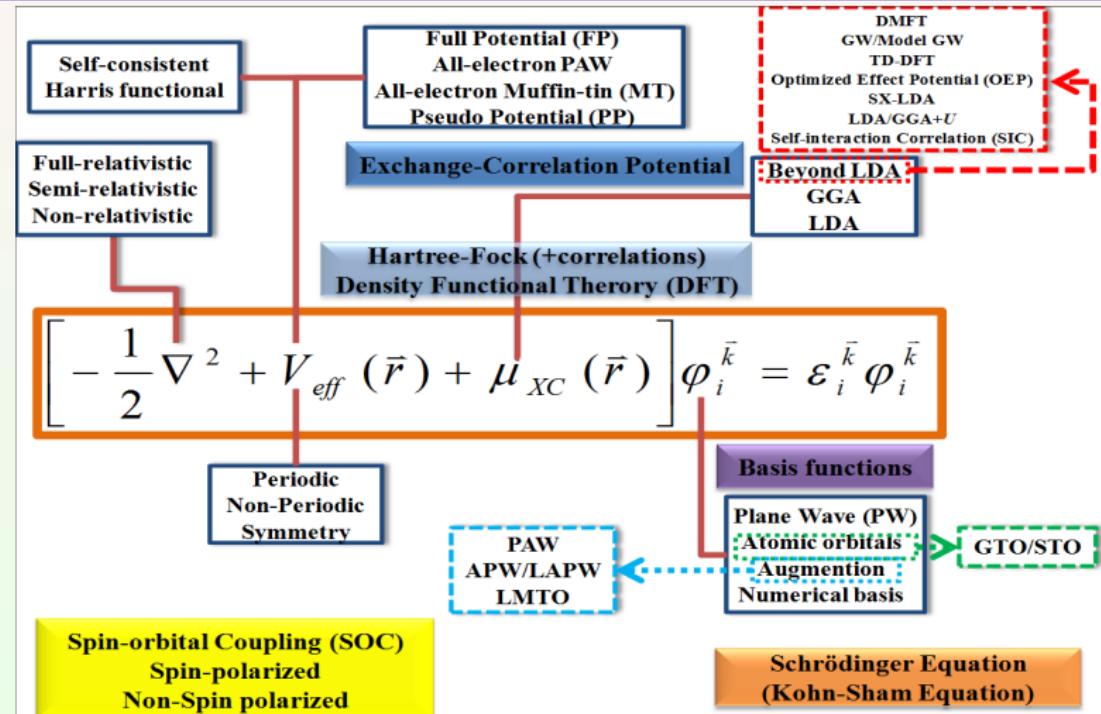


Fig.: The Analysis of Kohn-Sham equation.

# 密度 vs. 粒子与泛函表示

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

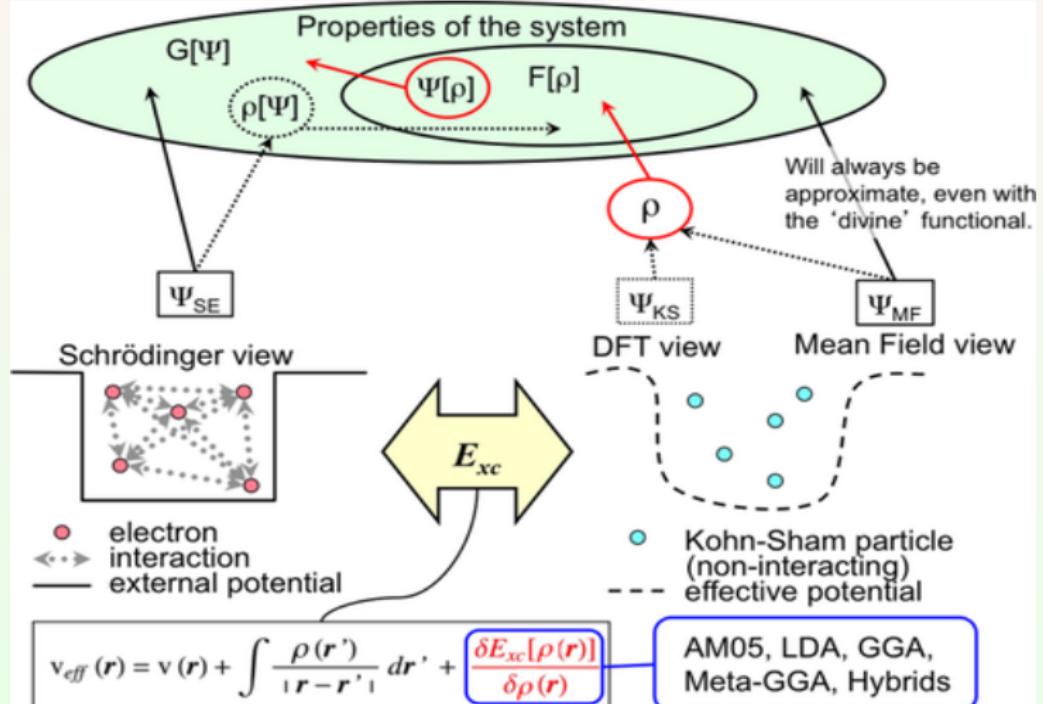
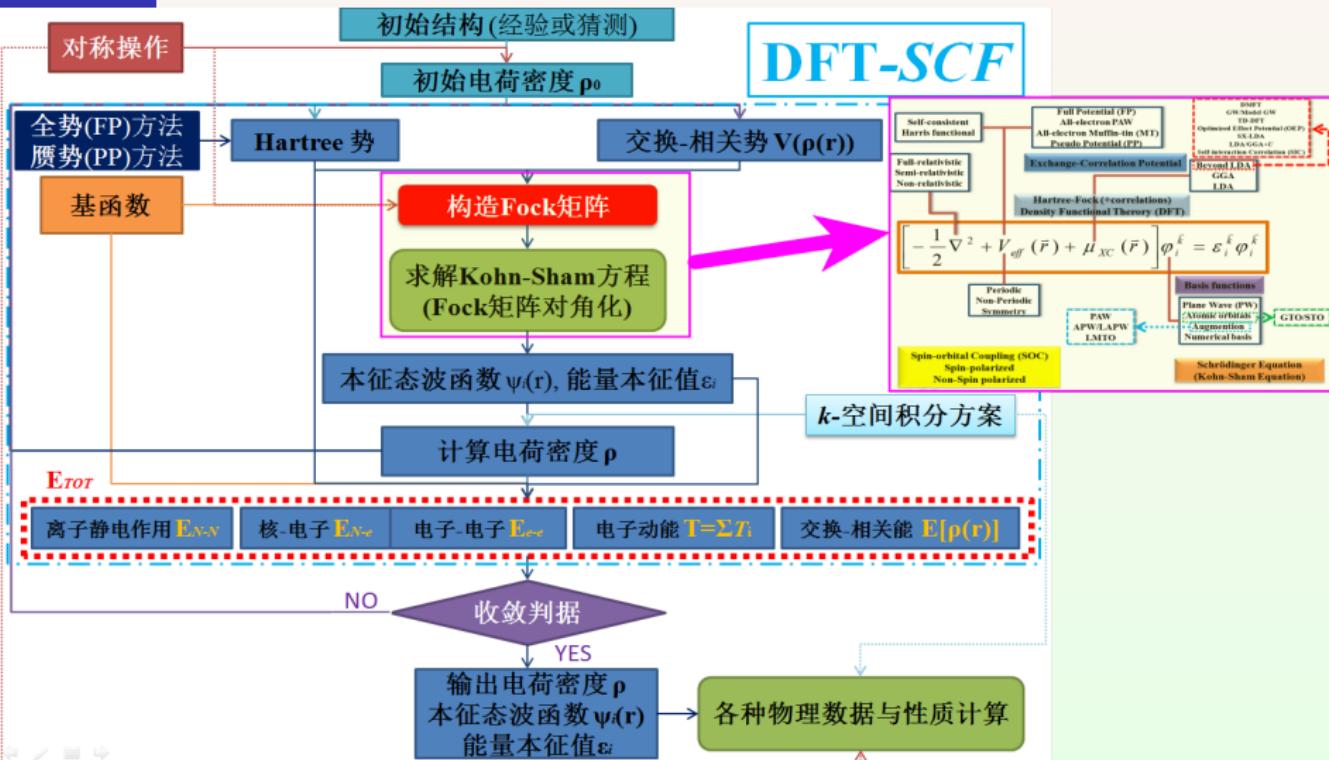


Fig.: Properties of a quantum mechanical system can be calculated by solving the SE (left). A more tractable, formally equivalent way is to solve the DFT/KS equations (right).

# 近似能量泛函 $E_{XC}[\rho]$ 的主要问题

- 1 密度是整体变量: 电子自相互作用抵消不净**  
用 DFT 计算电子数很少的体系, 一般都会有较大的误差
- 2 电子相关: 简并和近简并基态的表示不合理**  
基态电子密度用不同的简并轨道计算时, 体系能量应保持不变, 但现有的近似能量泛函不具有这个性质
- 3 渐近行为: 处理弱相互作用体系的误差大**  
如 Van der Waals 相互作用和现有近似能量泛函本身的计算误差在同一量级

# DFT-SCF



# 晶体总能量的一般表示

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{r}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

采用赝势方法计算的晶体总能量  $E_T$  由晶格中的电子能量  $E_{e-e}$  与离子实排斥能  $E_{N-N}$  之和:

$$E_T = E_{e-e} + E_{N-N} = T[\rho] + E_{ext} + E_{Coul} + E_{XC} + E_{N-N}$$

根据 Kohn-Sham 方程, 其中动能泛函用单电子能量表示为

$$T[\rho] = \sum_i n_i \langle \psi_i | \varepsilon_i - V_{KS} | \psi_i \rangle$$

$n_i$  是  $\psi_i$  上的电子占据数,  $\varepsilon_i$  是其能量本征值, 因此有

$$E_T = \sum_i n_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) [\epsilon_{XC}(\vec{r}) - V_{XC}(\vec{r})] + E_{N-N}$$

# 晶体总能量倒空间的表示

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Material-  
als Studio 为  
例

周期体系的总能量表达式在动量空间 ( $\vec{K}$  空间) 计算更方便

$$E_T = \sum_i n_i \varepsilon_i - \frac{\Omega}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \rho^*(\vec{k}) V_{\text{Coul}}(\vec{k}) + \Omega \sum_{\vec{k}} \rho^*(\vec{k}) [\epsilon_{\text{XC}}(\vec{k}) - V_{\text{XC}}(\vec{k})] + E_{N-N}$$

其中  $V_{\text{Coul}}(\vec{k})$ 、 $\epsilon_{\text{XC}}(\vec{k})$  与  $\rho^*(\vec{k})$  分别是 Coulomb 相互作用、单个电子的交换-相关能、交换-相关势和电子密度的 Fourier 分量。  
由 Poisson 方程

$$\nabla^2 V_{\text{Coul}}(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$$

的 Fourier 展开有

$$V_{\text{Coul}}(\vec{k}) = \frac{4\pi\rho^*(\vec{k})}{|\vec{k}|^2}$$

交换-相关势和交换-相关能的计算一般先在实空间计算  $\epsilon_{\text{XC}}(\vec{r})$  和  $V_{\text{XC}}(\vec{r})$  后, 再通过 Fourier 变换到动量空间, 得到  $\epsilon_{\text{XC}}(\vec{k})$  和  $V_{\text{XC}}(\vec{k})$

# $\vec{k}$ 空间布点与 Fermi 面的确定

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分

计算方法与软件分类

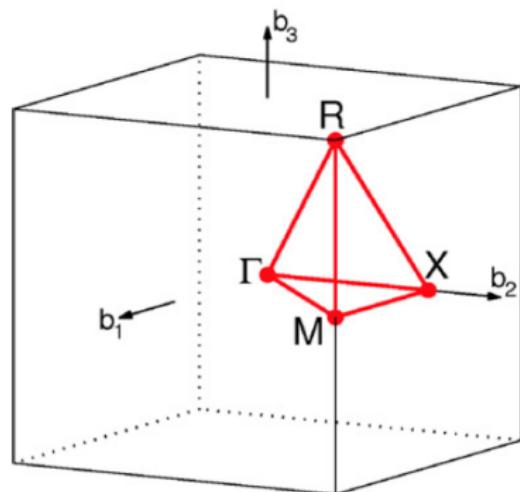
软件解方  
程: 迭代与优化

计算示  
例: VASP

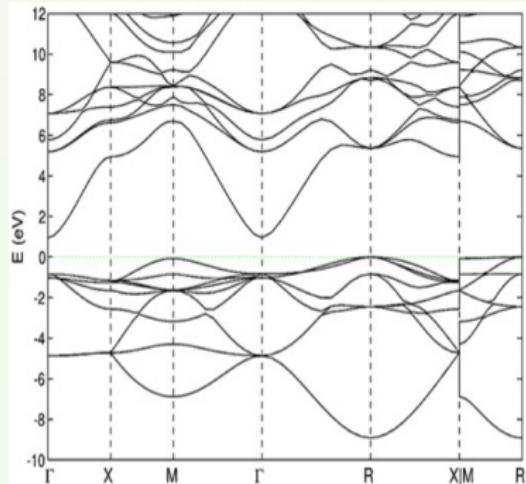
VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio 为  
例



(a) Brillouin Zone of Cubic lattice



(b) Band Structure of SrSnO<sub>3</sub>

在固体能带理论中, 能量色散关系  $\epsilon(\vec{k})$  表示能量在倒空间中分布,  
其中量子数  $\vec{k}$  (晶体动量) 描述平移对称性

# $\vec{k}$ 空间布点与 Fermi 面的确定

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

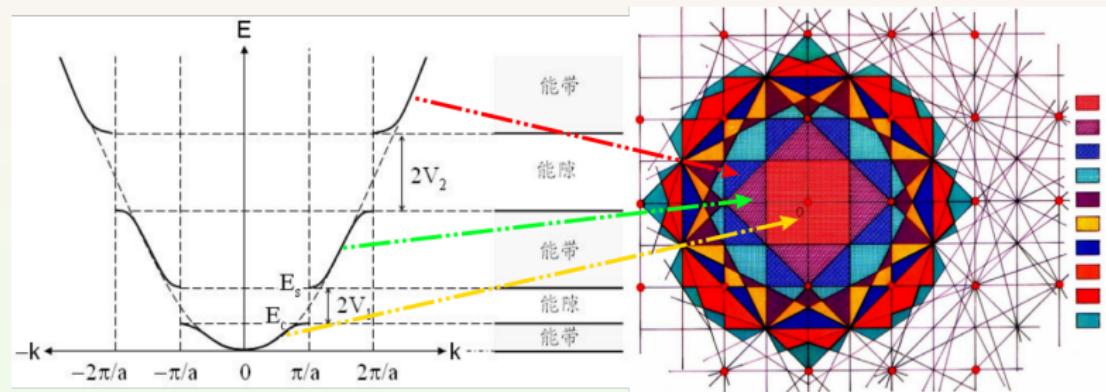


Fig.: The relation between unfolded-Band and the Brillouin-zone.

## 周期体系的 Fermi 能级和 Fermi 面的确定:

<b>导体:</b> <b>半导体-绝缘体:</b>	价电子在 Brillouin-zone 部分填充 价电子在 Brillouin-zone 完全填充
-------------------------------	--

# $\vec{k}$ 空间布点与 Fermi 面的确定

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例

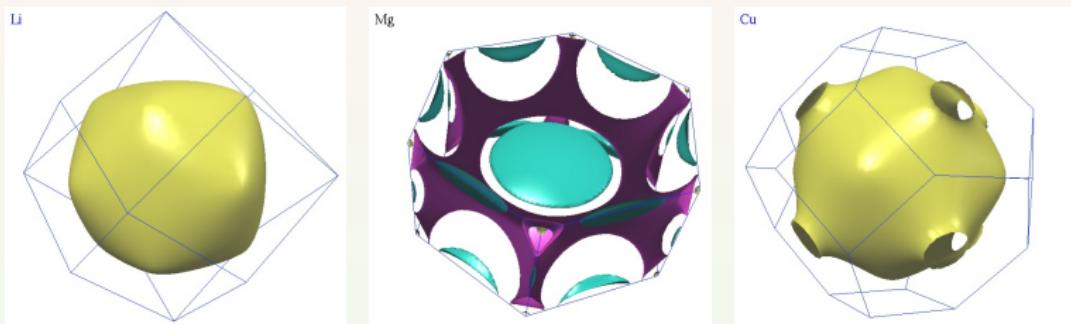


Fig.: The Fermi-surface of Li, Mg, Cu in the first Brillouin-zone.

Fermi 面的形状:

最高占据能带折叠到第一 Brillouin-zone 围成的区域

要确定 Fermi 面的精细结构, 特别是对于金属和导体体系, 必须在整个 Brillouin-zone 取足够多的采样点

# $\vec{k}$ 空间积分与物理量计算

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

与 Fermi 面的确定类似, 周期体系中所有单粒子期望值可表示为整个 Brillouin-zone 内占据态的矩阵元的积分

一般地, 如果已知 Brillouin-zone 某点  $\vec{k}$  的能带指标为  $n$  的波函数本征态  $\Psi_n(\vec{k})$  和本征值  $\epsilon_n(\vec{k})$ , 算符  $X$  的期望值  $\langle X \rangle$  是矩阵元

$$X_n(\vec{k}) = \langle \Psi_n(\vec{k}) | \mathbf{X} | \Psi_n(\vec{k}) \rangle$$

## 在倒空间全部占据能带的求和

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\sqrt{V_G}} \sum_n \int_{V_G} d^3k X_n(\vec{k}) f(\epsilon_n(\vec{k}))$$

其中  $V_G$  是第一 Brillouin-zone 体积,  $f(\epsilon)$  是占据分布函数  
实际计算中, Brillouin-zone 的  $\vec{k}$  点数是有限的

$$\langle X \rangle = \sum_{j,n} X_n(\vec{k}_j) w_n^{\vec{k}_j}$$

$\vec{k}$  点数目决定了电子结构和物理量的精度与计算量

# 空间布点方案

## 1 简单分布函数

### ■ Fermi-Dirac 分布函数

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} + 1}$$

其中  $\mu$  是化学势,  $k$  是 Boltzmann 常数,  $T$  是温度参数

### ■ Gaussian 分布函数

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\varepsilon - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

其中  $\mu$  是化学势,  $\sigma$  是展宽参数

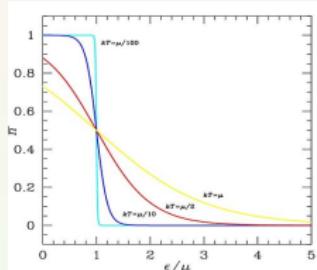


Fig.: The Fermi-Dirac Distribution.

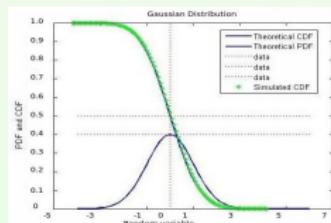


Fig.: The Gaussian Distribution.

# $\vec{k}$ 空间布点方案

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

## 2 特殊点方法 (Special-point scheme)

这是一种相对高效的积分方法, 通过选取少量有代表性的  $\vec{k}$  点, 即可获得较高的计算精度, 这些  $\vec{k}$  点被称为“平均值点”或“特殊点”

特殊点方法对导体的收敛性较差

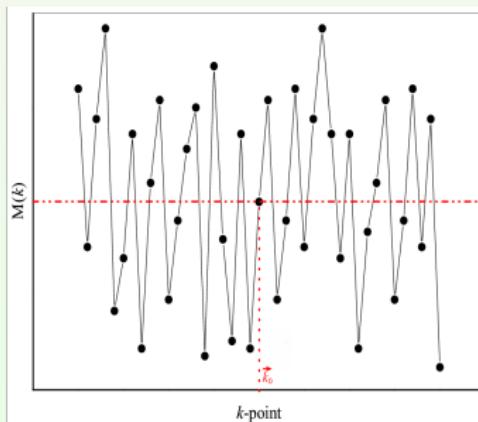


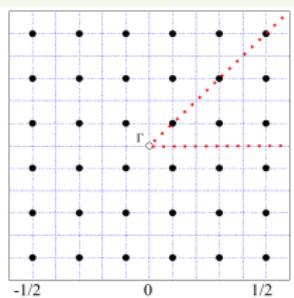
Fig.: The mean value and the  $\vec{k}$ -point.

# Monkhorst-Pack 布点方案

- 最初的特殊点方案必须首先确定  $2 \sim 3$  个性能较好的  $\vec{k}$  点，由此构建  $\vec{k}$  点集合拥有比较高的效率和精度，所以每个具体体系，计算前必须经过相当的对称性分析。从程序编写角度来说，非常麻烦
- Monkhorst-Pack 提出一套简易的  $\vec{k}$  点网格生成方法：

Monkhorst-Pack 简易按如下方案  
划分 Brillouin-zone:

$$u_r = \frac{(2r - q - 1)}{2q} \quad (r = 1, 2, 3, \dots, q)$$



$q$  是确定特殊点数目的某个整数

$$A_m(\vec{k}) = N_m^{-1/2} \sum_{|\vec{R}|=C_m} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

Fig.: The generation of special  $\vec{k}$ -points in Monkhorst-Pack method.

# $\vec{k}$ 空间布点方案

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

## 3 四面体方法 (Tetrahedron schemen)

这是一种线性插值方法, 将 Brillouin-zone 用体积相等的四面体填充, 在每个四面体内部, 被积函数  $X_n(\vec{k}_j)$  和能量  $\varepsilon_n^{\vec{k}_j}$  都随  $\vec{k}$  点线性变化

一般来说, 四面体方法对金属和导体的 Fermi 面确定更可靠

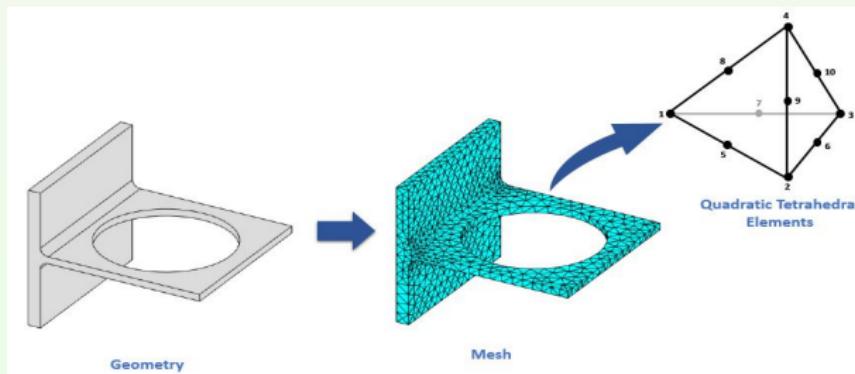


Fig.: Schematic representation of a finite element method FEM-model.

# 各种 $\vec{k}$ 空间积分方法的比较

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例

积分方案	布点方案: Monkhorst-Pack 方法			
	Fermi-Dirac 方法	Methfessel-Paxton 方法	Tetrahedron 方法	
	Gaussian	$N > 0$		
半导体、 绝缘体	✗	$\delta \leq 0.05$ ✓	✗	DOS & total-Energy ✓
导体、 金属	✓	Phonon & relaxation ✓		DOS & total-Energy ✓
supercell	✓	✓		✗

如何方便地确定每个  $\vec{k}$  点的积分权重  $w_n^{\vec{k}_i}$ , 精确、高效地完成  
Brillouin-zone 积分是  $\vec{k}$  空间布点方案的主要研究内容

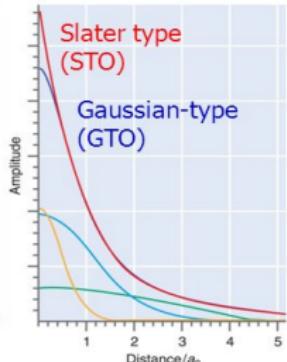
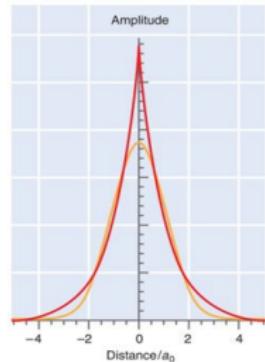
# 基组: 张开空间, 展开波函数

## Basis set (a set of basis functions)

$$\phi_{1s} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{\zeta}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\zeta r/a_0}$$

$$\phi_j(r) = \sum_{i=1}^m c_i f_i(r) \quad \text{or } r^2$$

$$\phi_{1s}(r) = \sum_{i=1}^m c_i N_i e^{-\zeta_i r/a_0}$$



Number of Basis Functions, $m$	Exponents, $\zeta_i$	Total Energy of He, $\epsilon_{total}$ (eV)	1s Orbital Energy, $\epsilon_{1s}$ (eV)	$\epsilon_{total} - 2\epsilon_{1s}$ (eV)
5	1.41714, 2.37682, 4.39628, 6.52699, 7.94252	-77.8703	-24.9787	-27.9129
2	2.91093, 1.45363	-77.8701	-24.9787	-27.9133
1	1.68750	-77.4887	-24.3945	-28.6998

The data is taken from E. Clementi and C. Roetti, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 14 (1974), 177.

Fig.: Schematic illustration of scattering of a Basic-set STO GTO.

# 固体能带计算方法

## 常用的固体能带计算方法

- 平面波方法
- 正交平面波 (The orthogonalized plane wave, OPW) 和赝势 (Pseudo-potential, PP) 方法<sup>[1, 2, 3]</sup>
- 缀加平面波 (Augmented plane wave, APW) 方法
- MT 轨道 (Muffin-tin orbitals, MTO) 方法<sup>[4]</sup>
- 投影子缀加波 (Projector Augmented Wave, PAW) 方法<sup>[5, 6]</sup>

各种方法的主要区别: 势函数的处理与所选基函数类型不同

# 固体计算软件概览

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

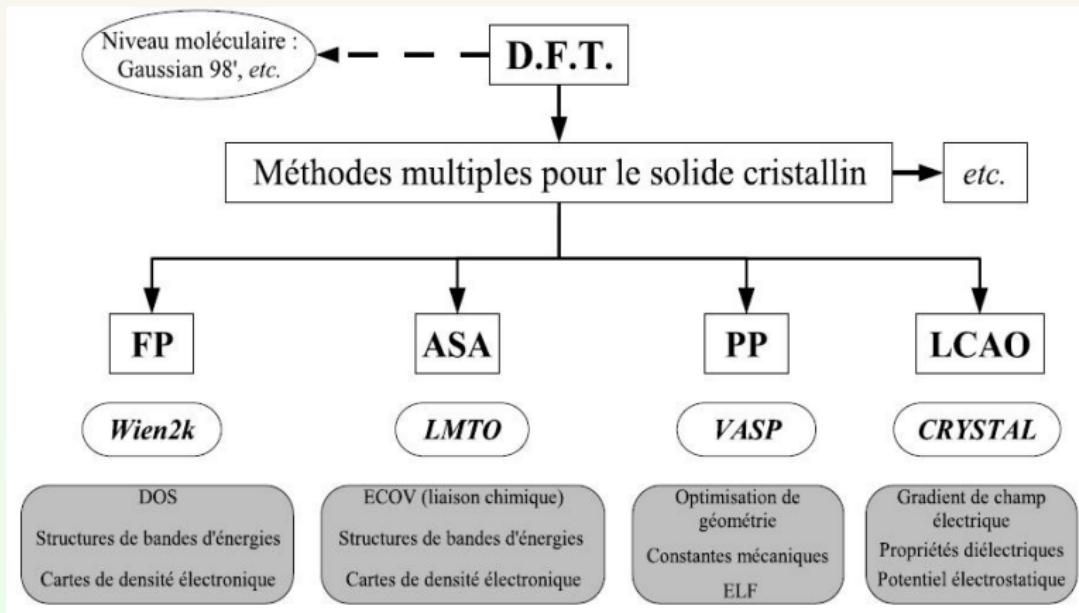
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



# 非线性方程的 Newton 法求根

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

不管哪一种数值算法，其设计原理都是将复杂转化为简单的重复，或者说，通过简单的重复生成复杂：

**在算法设计和算法实现过程中，重复就是力量**  
**迭代算法设计：“速度” vs “稳定”**

# 迭代优化基本思想

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

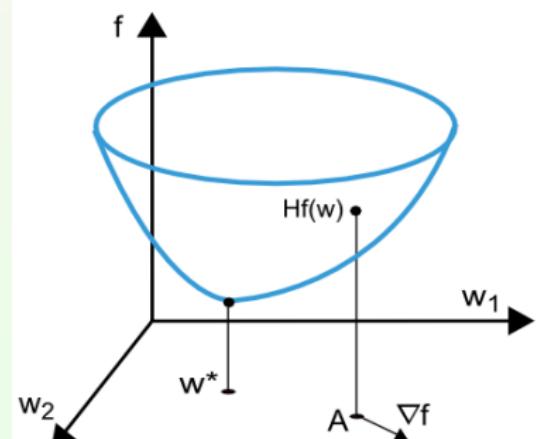
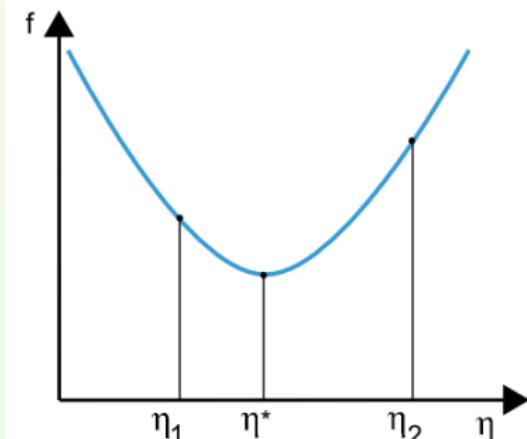
Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

对于给定函数  $f$ , 在极值点, 函数的梯度满足

$$\nabla f = 0$$

可将函数极值问题转化成方程求根问题



# 最陡下降与共轭梯度

## 材料模拟软件 与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

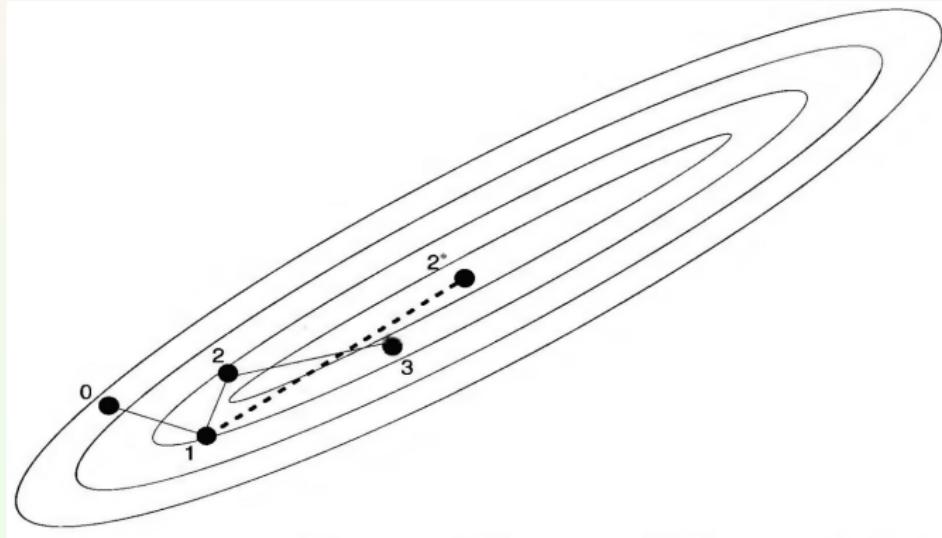
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



**Fig.:** Schematic illustration of minimization of a function in two dimensions. The steps 1,2,3, ... denote the steepest descent steps and the point ----- denote the conjugate gradient path that reaches the exact solution after two steps if the functional is quadratic.

# 共轭梯度的“轭”

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

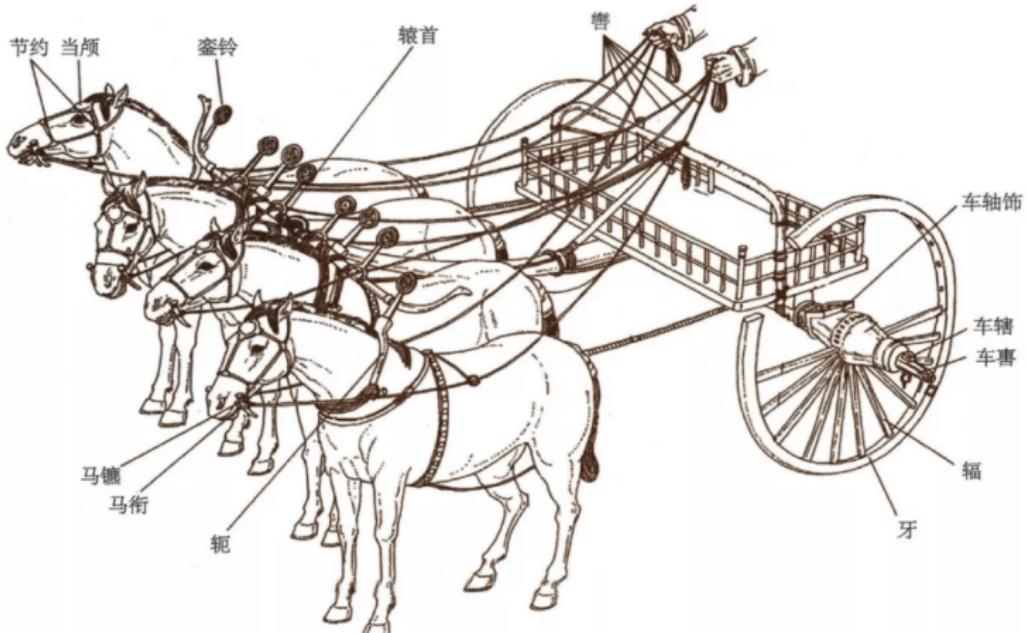
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



# 共轭的含义

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

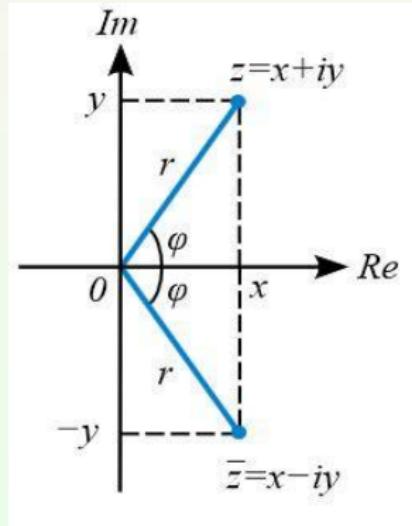
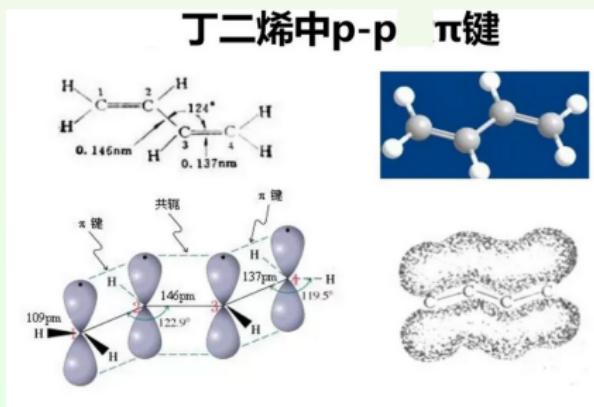
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例



# 主要参考文献

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

- [1] D. J. Singh. *Plane Wave, PseudoPotential and the LAPW method* (Kluwer Academic, Boston, USA, 1994)
- [2] D. Vanderbilt. *Phys. Rev. B*, **41** (1990), 7892
- [3] G. Kresse and J. Hafner. *J. Phys: Condens. Matter*, **6** (1994), 8245
- [4] H. Skriver. *The LMTO method* (Springer, New York, USA, 1984)
- [5] P. E. Blöchl. *Phys. Rev. B*, **50** (1994), 17953
- [6] G. Kresse and D. Joubert *Phys. Rev. B*, **59** (1999), 1758
- [7] O. K. Andersen. *Computational Methods in Band Theory* (Plenum, New York, USA, 1971)
- [8] V. V. Nemoshkalenko and V. N. Antonov. *Computational Methods in Solid State Physics* (Gordon and Breach Science Publisher, Amsterdam, The Netherlands, 1998)
- [9] 谢希德、陆栋 主编. 固体能带理论 复旦大学出版社, 上海, 1998
- [10] Richard. M. Martin. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2004)
- [11] J. M. Thijssen. *Computational Physics* (2nd Edition) (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2007)

# VASP 软件简介

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
K 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

VASP 软件是维也纳大学 (Universität Wien) G. Kresse 等开发的第一原理模拟软件包

- VASP 采用 PAW (Projector Augmented-Wave) 方法, 平衡了赝势方法和全电子计算优点, 兼顾了计算的精度和效率
- VASP 在实空间优化投影函数 (Projector), 将主要的计算过程变换到实空间完成, 大大节省了内存的开销
- VASP 通过引入多样的优化算法, 提高了矩阵对角化和电荷密度搜索的效率
- 在 VASP 的并行计算中, 有效均衡了各节点处理 FFT 变换负载和通信, 提升了软件的并行效率

相比于其他第一原理计算软件, VASP 从物理思想与方法、优化算法和并行计算实现等多个方面都有更为出色的性能

# VASP 的开发团队

## The VASP team



o. Univ. Prof. Dr. Georg Kresse



Dr. Doris Vogtenhuber



Dr. Martijn Marsman



Dr. Merzuk Kaltak



Dr. Ferenc Karsai



Dr. Martin Schlipf

Fig.: The development team of VASP.

# VASP 的 Kohn-Sham 方程求解流程

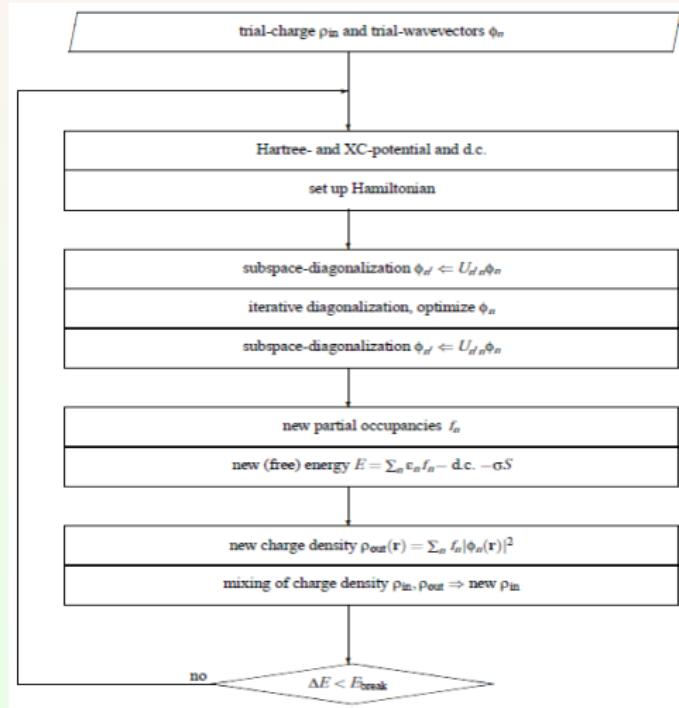


Fig.: The Flow of calculation for the KS-ground states.

# VASP 软件简介

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
K 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

VASP 软件是维也纳大学 (Universität Wien) G. Kresse 等开发的第一原理模拟软件包

- VASP 采用 PAW (Projector Augmented-Wave) 方法, 平衡了赝势方法和全电子计算优点, 兼顾了计算的精度和效率
- VASP 在实空间优化投影函数 (Projector), 将主要的计算过程变换到实空间完成, 大大节省了内存的开销
- VASP 通过引入多样的优化算法, 提高了矩阵对角化和电荷密度搜索的效率
- 在 VASP 的并行计算中, 有效均衡了各节点处理 FFT 变换负载和通信, 提升了软件的并行效率

相比于其他第一原理计算软件, VASP 从物理思想与方法、优化算法和并行计算实现等多个方面都有更为出色的性能

# VASP 的开发团队

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

## The VASP team



o. Univ. Prof. Dr. Georg Kresse



Dr. Doris Vogtenhuber



Dr. Martijn Marsman



Dr. Merzuk Kaltak



Dr. Ferenc Karsai



Dr. Martin Schlipf

Fig.: The development team of VASP.

# VASP 的 Kohn-Sham 方程求解流程

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例

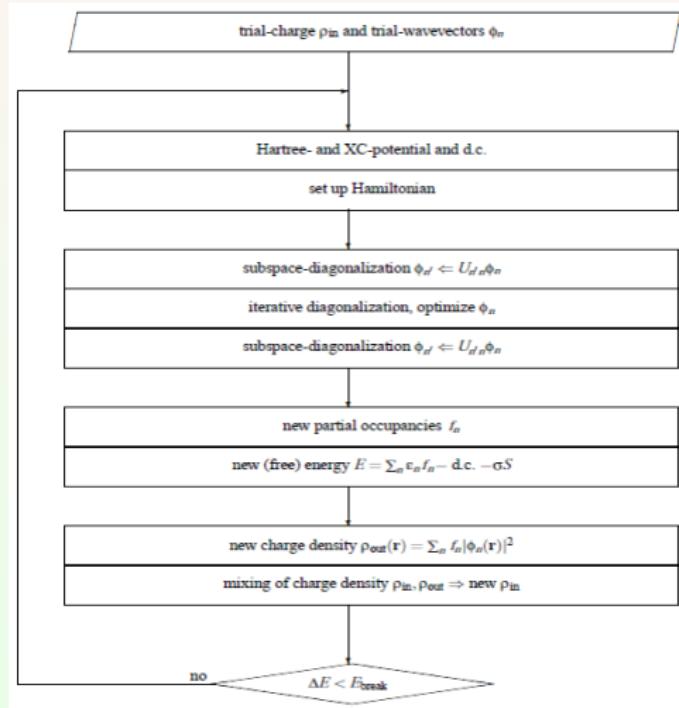


Fig.: The Flow of calculation for the KS-ground states.

# Si 的结构: FCC

Si 晶胞是金刚石结构, 晶胞参数  $a_0 = 5.47\text{\AA}$  (由结构弛豫确定)

**Si-diamond**

**5.470**

0.50000000000000 0.50000000000000 0.00000000000000  
0.00000000000000 0.50000000000000 0.50000000000000  
0.50000000000000 0.00000000000000 0.50000000000000

**2**

**Cartesian**

0.00000000000000 0.00000000000000 0.00000000000000  
0.25000000000000 0.25000000000000 0.25000000000000

**Fig.:** Si 的原胞: POSCAR 文件.

# Si 的初基原胞

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分

计算方法与软件分类

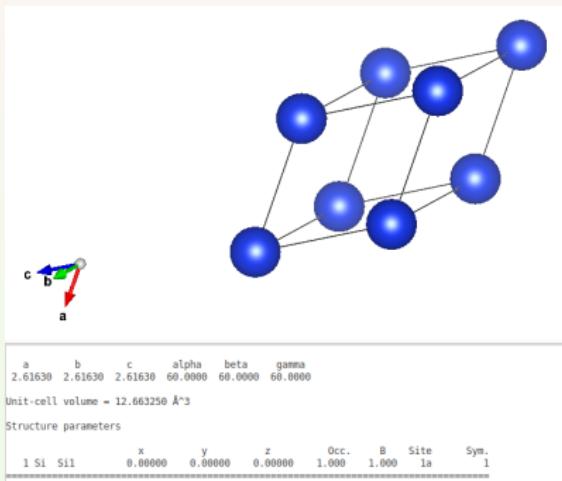
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例



```
cubic      #diamond comment line
3.7        #universal scaling factor
0.5 0.5 0.0 #first Bravais lattice vector
0.0 0.5 0.5 #second Bravais lattice vector
0.5 0.0 0.5 #third Bravais lattice vector
1          #number of atoms per species
direct     #direct or cart (only first letter is significant)
0.0 0.0 0.0 #positions
```

# Si 的初始计算: 输入文件

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Material-  
als Studio 为  
例

```
Automatic mesh
0          # number of k-points = 0 ->automatic generation scheme
Gamma      # generate a Gamma centered grid
10 10 10   # subdivisions N_1, N_2 and N_3 along recipr. l. vectors
0. 0. 0.   # optional shift of the mesh (s_1, s_2, s_3)
```

```
SYSTEM = Si
# electronic degrees
ENCUT = 120
LREAL = A           # real space projection
PREC = Normal      # chose Low only after tests
EDIFF = 1E-5        # do not use default (too large drift)
ISMEAR = -1 ; SIGMA = 0.172 # Fermi smearing: 2000 K 0.086 10-3
ALGO = Very Fast   # recommended for MD (fall back ALGO = Fast)
MAXMIX = 40         # reuse mixer from one MD step to next
NCORE= 4            # one orbital on 4 cores
ISYM = 0             # no symmetry
NELMIN = 4           # minimum 4 steps per time step, avoid breaking after 2 steps
# LREAL = .FALSE.
# MD (do little writing to save disc space)
IBRION = 0 ; NSW = 100 ; NWRITE = 0 ; LCHARG = .FALSE. ; LWAVE = .FALSE.
TEBEG = 2000 ; TEEND = 2000
# canonic (Nose) MD with XDATCAR updated every 50 steps
SMASS = 3 ; NBLOCK = 50 ; POTIM = 1.5
# micro canonical MD with temperature scaling every 50 steps
# good for equilibration but usually better to use Nose thermostat
# SMASS = -1 ; NBLOCK = 50 ; POTIM = 1.5
```

# Si 的初始计算: POTCAR

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

```

PAW_PBE Si 05Jan2001
4.0000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =Sl: s2p2
LEXCH = PE
EATOM = 103.0669 eV, 7.5752 Ry

TITEL = PAW_PBE Si 05Jan2001
LULTRA = F use ultrasoft_PP ?
IUNSCHR = 1 unscreen: 0-lin 1-nonlin 2-no
RPACOR = 1.500 partial core radius
POMASS = 28.085; ZVAL = 4.000 mass and valenz
RCORE = 1.900 outmost cutoff radius
RWIGS = 2.480; RWIGS = 1.312 wigner-seitz radius (au A)
ENMAX = 245.345; ENMIN = 184.009 eV
ICORE = 2 local potential
LCOR = T correct aug charges
LPAN = T paw PP
EAUG = 322.069
DEXC = -.007
RMAX = 2.944 core radius for proj-oper
RAUG = 1.300 factor for augmentation sphere
RDEP = 1.993 radius for radial grids
QCUT = -4.246; QCUT = 8.493 optimization parameters

Description
l E TYP RCUT TYP RCUT
0 .000 23 1.900
0 .000 23 1.900
1 .000 23 1.900
1 .000 23 1.900
2 .000 7 1.900

Error from kinetic energy argument (eV)
NDATA = 100
STEP = 20.000 1.050
10.1 9.04 8.56 7.65 7.23 6.44 5.73 5.40
4.79 4.25 4.00 3.54 3.13 2.77 2.45 2.16
1.91 1.69 1.50 1.24 1.10 .975 .812 .718
.636 .529 .440 .388 .322 .266 .219 .180
.148 .121 .986E-01 .804E-01 .614E-01 .504E-01 .392E-01 .328E-01
.265E-01 .220E-01 .189E-01 .166E-01 .149E-01 .135E-01 .123E-01 .109E-01
.977E-02 .840E-02 .707E-02 .605E-02 .488E-02 .387E-02 .290E-02 .229E-02

```

# VASP 计算示范: Si

## 材料模拟软件 与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计  
算示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

```

vasp.5.4.1 05Feb16 (build May 09 2017 15:55:29) complex
executed on           LinuxIFC date 2018.12.15 16:00:28
running on   24 total cores
distrk: each k-point on   24 cores,    1 groups
distr: one band on NCORES_PER_BAND=   1 cores,   24 groups

-----[INCAR]-----
INCAR:
POTCAR: PAW_PBE Si 05Jan2001

-----[POTCAR]-----
W   W   AA   RRRR   N   N   II   N   N   GGGG   !!!
W   W   A   A   R   R   NN   N   II   NN   N   G   G   !!!
W   W   A   A   R   R   NN   N   II   NN   N   G   G   !!!
W   W   W   AAAAAA   RRRR   N   N   N   II   N   N   N   G   GGG   !
WW   WW   A   A   R   R   N   NN   II   N   NN   G   G   !
W   W   A   A   R   R   N   N   II   N   N   GGGG   !!!
For optimal performance we recommend to set
NCORE= 4 - approx SQRT( number of cores)
NCORE specifies how many cores store one orbital (NPAR=cpu/NCORE).
This setting can greatly improve the performance of VASP for DFT.
The default, NPAR=number of cores might be grossly inefficient
on modern multi-core architectures or massively parallel machines.
Do your own testing !!!!.
Unfortunately you need to use the default for GW and RPA calculations.
(for HF NCORE is supported but not extensively tested yet)

-----[POTCAR]-----
POTCAR: PAW_PBE Si 05Jan2001
VRHFIN =Si: s2p2
LEXCH = PE
EATOM = 103.0669 eV,    7.5752 Ry
TITEL = PAW_PBE Si 05Jan2001
LULTRA = F use ultrasoft PP ?

```

# VASP 计算示范: Si

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计  
算示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

```

augmentation part      -0.2585119 magnetization
Free energy of the ion-electron system (eV)
-----
alpha Z    PSCENC =      1.69359067
Ewald energy TEWEN =   -122.82983823
-Hartree energ DENC =   -1.28509908
-exchange EXHF =      0.00000000
-V(xc)+E(xc) XCENC =   -9.57697808
PAW double counting =  32.68155839      -15.06110639
entropy T*S EENTRO =   -0.00386598
eigenvalues EBANDS =   0.73784546
atomic energy EATOM =  103.06077658
Solvation Ediel_sol =  0.00000058

free energy TOTEN =   -4.58311667 eV
energy without entropy = -4.57925068  energy(sigma->0) =      -4.58118367
-----
```

```

average (electrostatic) potential at core
the test charge radil are      0.9892
(the norm of the test charge is      1.0000)
1 -83.7495
```

```
E-fermi : 6.3823    XC(G=0): -9.9470    alpha+bet :-12.0666
```

k-point	1 :	0.0000	0.0000	0.0000
band No.	band energies	occupation		
1	-5.3695	0.00000		
2	14.2509	0.00000		
3	14.2509	0.00000		
4	14.2509	0.00000		
5	17.3365	0.00000		

# Si 的静态计算

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

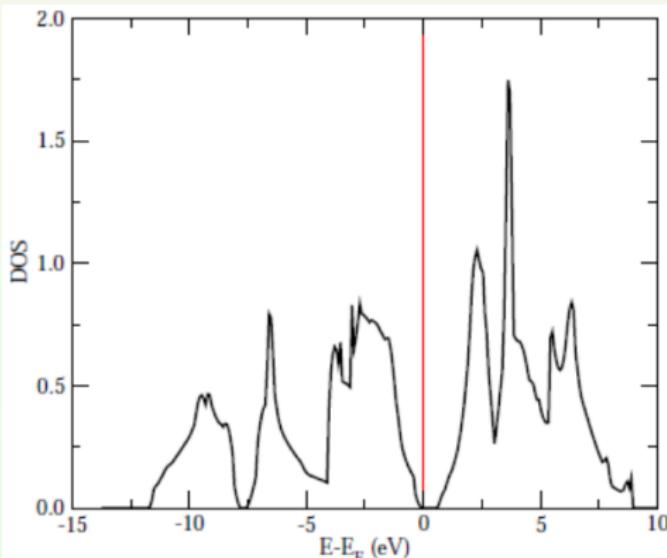
Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio 为  
例

## 静态计算: 确定基态电荷密度

### 材料电子学性质计算的起点

静态计算完毕, 可以从文件 OSZICAR 得到体系的基态能量, 电荷密度则保存到文件 CHGCAR 中



# 能带计算与 $\vec{k}$ 点选择

## 材料模拟软件 与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优化

计算示  
例: VASP

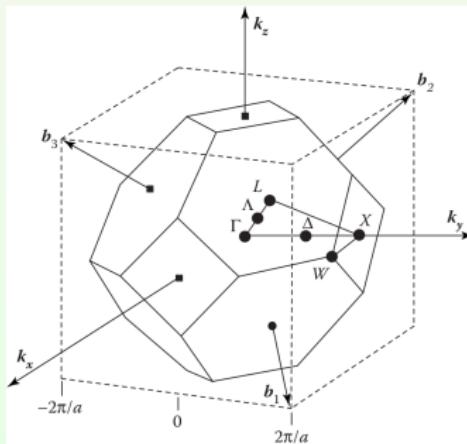
VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

Tab.1 FCC 的第一 Brillouin 区中高对称性点的列表

Points	Reciprocal coordinates (unit of $b_1, b_2, b_3$ )	Cartesian coordinates unit of $2\pi/a$
$\Gamma$	0 0 0	0 0 0
X	1/2 0 1/2	0 1 0
W	3/4 1/2 1/4	0 1/2 1
L	1/2 1/2 1/2	1/2 1/2 1/2
$\Delta$	1/4 0 1/4	0 1/2 0
$\Lambda$	1/4 1/4 1/4	1/4 1/4 1/4



# Si 能带计算

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类  
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

由 Brillouin 区  $\vec{k}$  点连线, 确定 KPOINTS 文件的  $\vec{k}$  点分布:  
沿  $\vec{k}$  点路线 W – L –  $\Gamma$  – X – W 共计 80 个  $\vec{k}$  点 (20 点/连线  $\times$  4 组连线)

```

k-points      # for band structure
20           # calculates energies for 20 points per each line
Line mode
Rec          # positions of high-symmetry k-points in the first BZ
0.75 0.5 0.25 # line starting at W to L
0.5 0.5 0.5
0.5 0.5 0.5 # line starting at L to G
0 0 0
0 0 0        # line starting at G to X
0.5 0.5 0
0.5 0.5 0    # line starting at X to W
0.75 0.5 0.25

```

Fig.: Si 的能带计算时 KPOINTS 的设置.

```

.....
ISTART = 1
ICHARG = 11
NBANDS = 8      # number of bands
.....

```

Fig.: Si 的能带计算中的 INCAR 设置.

# Si 能带

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $k$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

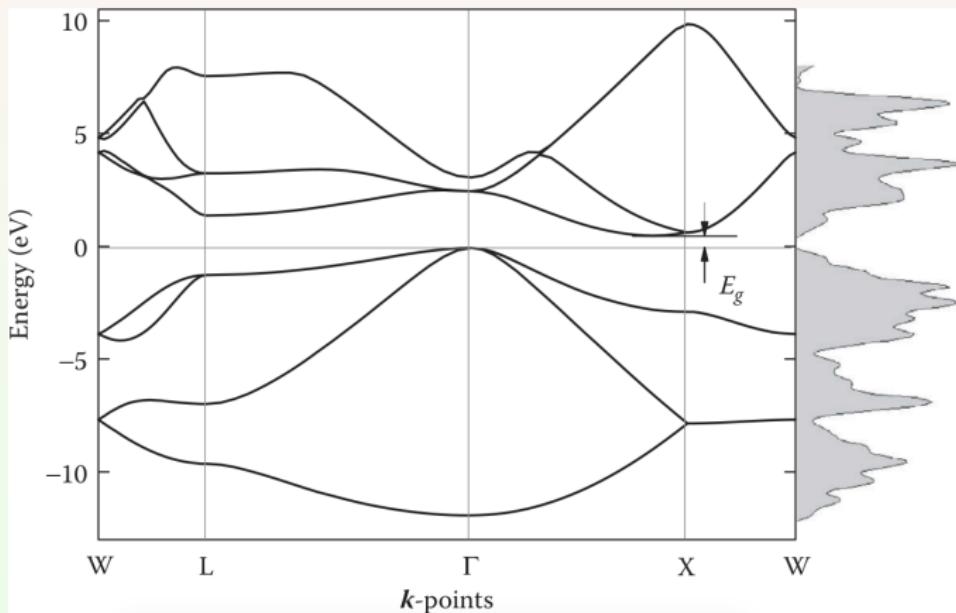


Fig.: Si 的能带和相应的态密度图, 从能带图看出 Si 是间接带隙半导体.

Si 是半导体, 带隙  $E_g = 0.61\text{eV}$  (该值仅为实验测得带隙的  $1/2$ , 因 DFT 先天不足, 低估带隙)

# Si 的能带可视化: p4vasp

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
K 空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

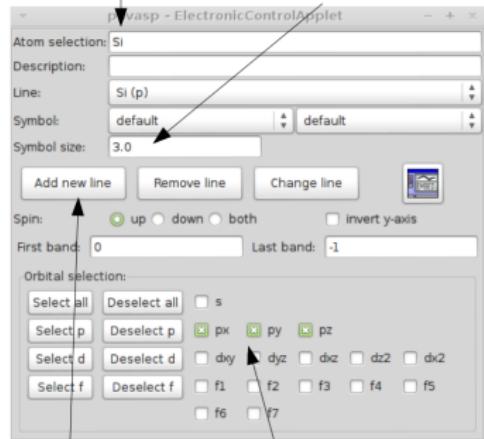
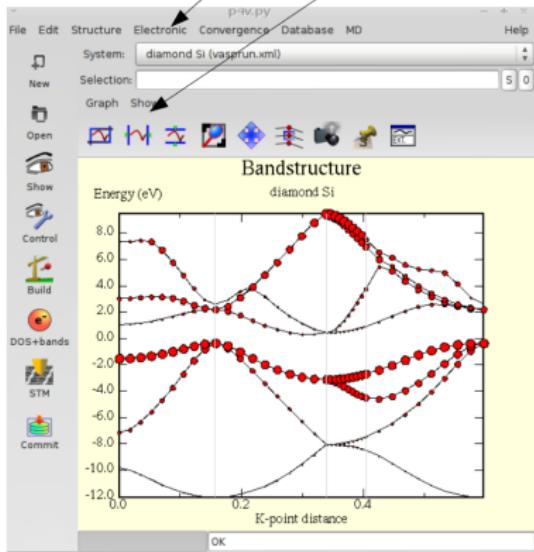
Start p4vasp:  
> p4v [vasprun.xml]

Step 1.) go to:  
Electronic/Local DOS+bands control

Step 2.) Go to: Show/Bands

Step 3.) select atoms: "all", "Si", "1", "2", ...

Step 4.) adjust symbol size



Step 5.) select orbital character

Step 6.) and "add new line"

# Si 能带与本征值

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

由 OUTCAR 可知 Fermi 能级为 5.6980eV

```
.....                                # a series of 80 data sets starts from here
0.7500000E+00 0.5000000E+00 0.2500000E+00 0.1250000E-01
1 -1.975362                         # E at band 1 and k-points W
2 -1.975360
3 1.856500
4 1.856511
5 9.908947
6 9.908990
7 10.556935
8 10.556951
.....
0.7500000E+00 0.5000000E+00 0.2500000E+00 0.1250000E-01
1 -1.975362
2 -1.975360
3 1.856500
4 1.856511
5 9.908947
6 9.908990
7 10.556935
8 10.556951
```

Fig.: VASP 计算 Si 的能量本征值文件 EIGENVAL(部分).

# MS 的架构

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio 为  
例

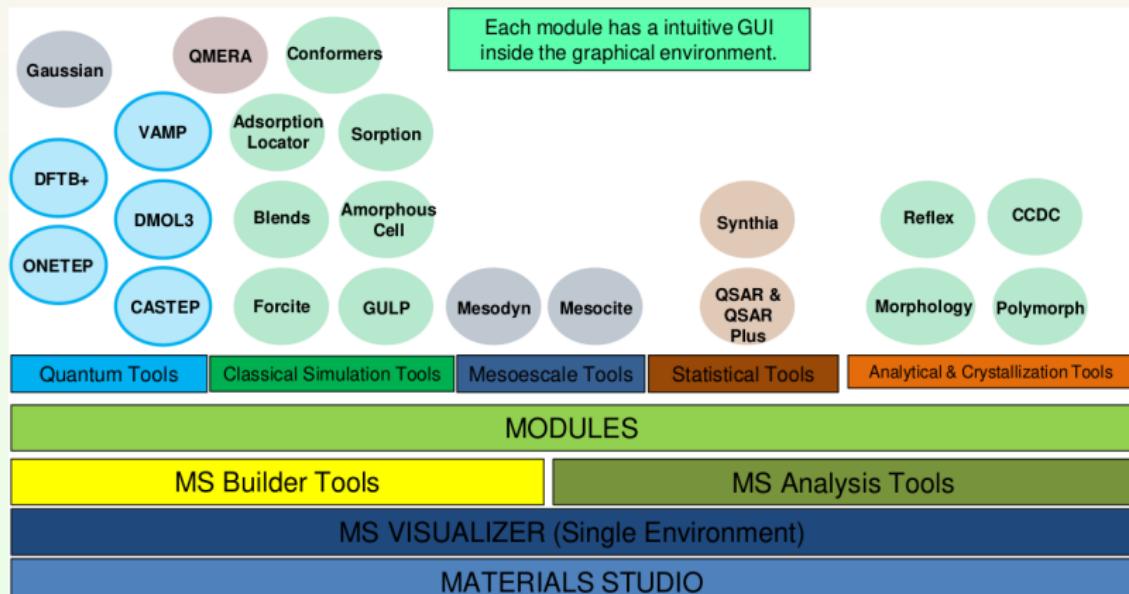


Fig.: The main structure of Materials studio.

# MS 的界面框架

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

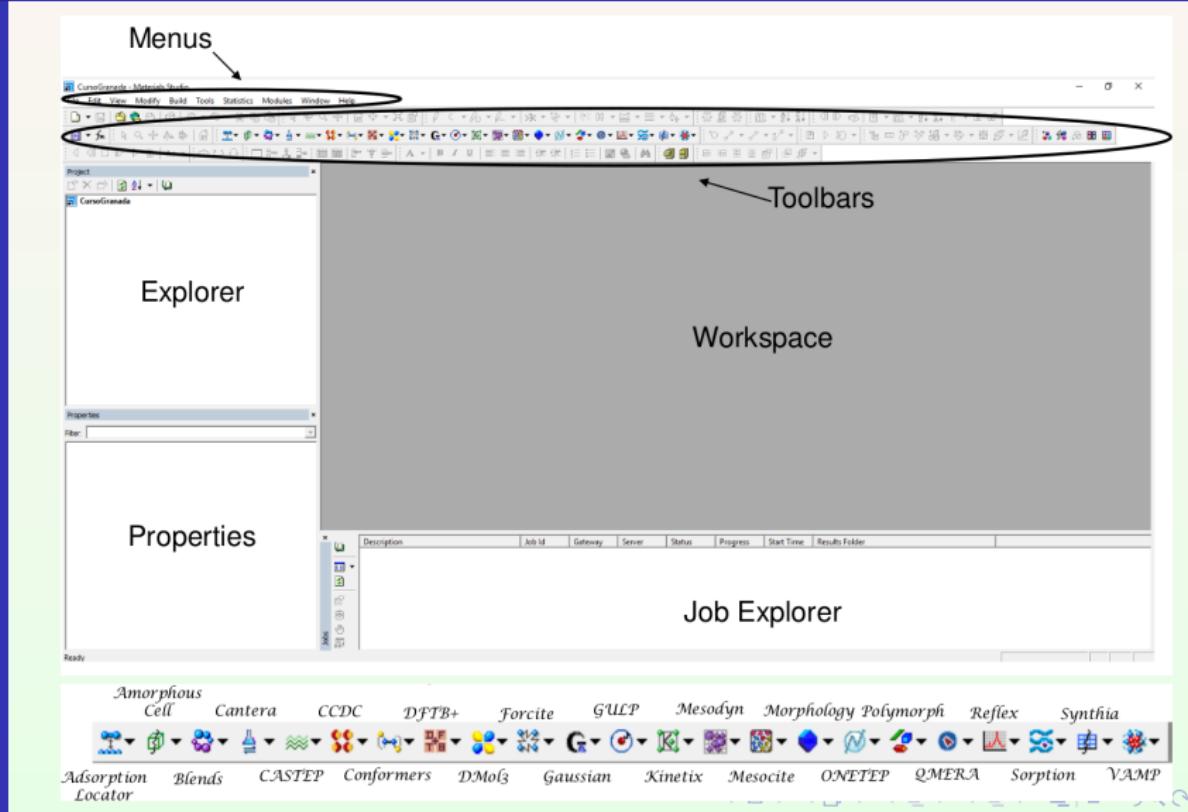
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio 为  
例



# MS 的界面框架: Indigo

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分

计算方法与软件分类

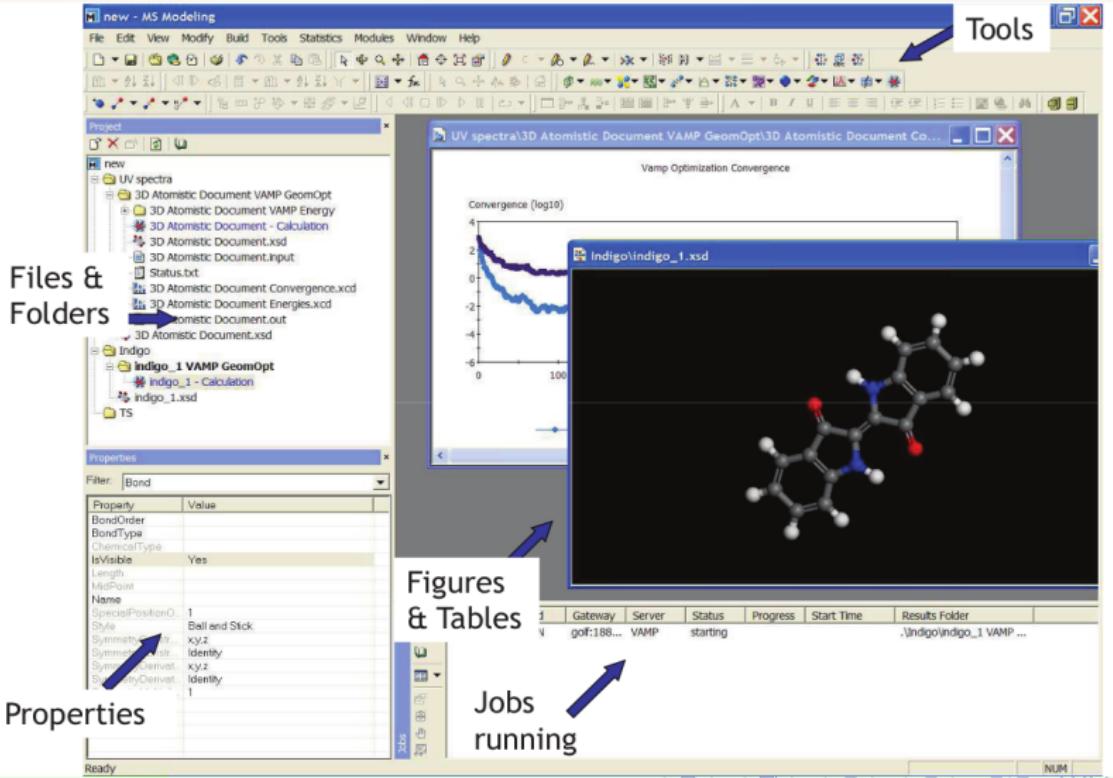
软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例



The screenshot shows the Indigo software interface with the following components:

- Top Bar:** File, Edit, View, Modify, Build, Tools, Statistics, Modules, Window, Help.
- Tools Menu:** An arrow points to the 'Tools' menu item.
- Project Explorer:** Shows the 'new - MS Modeling' project structure under 'UV spectra'. It includes sub-folders like '3D Atomistic Document VAMP GeomOpt', '3D Atomistic Document Energy', '3D Atomistic Document Input', 'Status.txt', '3D Atomistic Document Convergence.xcd', '3D Atomistic Document Energies.xls', and '3D Atomistic Document.out'.
- Properties Panel:** A 'Properties' panel is open, showing a table for a 'Bond' object. One row is highlighted with 'IsVisible' set to 'Yes'. Other properties listed include BondOrder, BondType, ChemicalType, Length, MidPoint, Name, SpecificPosition, Style, SymmetricOrder, SymmetricStyle, SymmetricDeviation, and SymmetricDerivative.
- Figures & Tables:** A panel titled 'Figures & Tables' displays a plot of 'Convergence (log10)' versus an index from 0 to 100, showing a blue curve that decreases over time. To the right of the plot is a 3D ball-and-stick model of a molecule, specifically Indigo, with atoms represented by spheres and bonds by lines.
- Jobs running:** A status bar at the bottom indicates '4 goff:188... VAMP starting .\Indigo\indigo\_1 VAMP ...' and 'Jobs running'.

# MS: Quick Start-01



材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

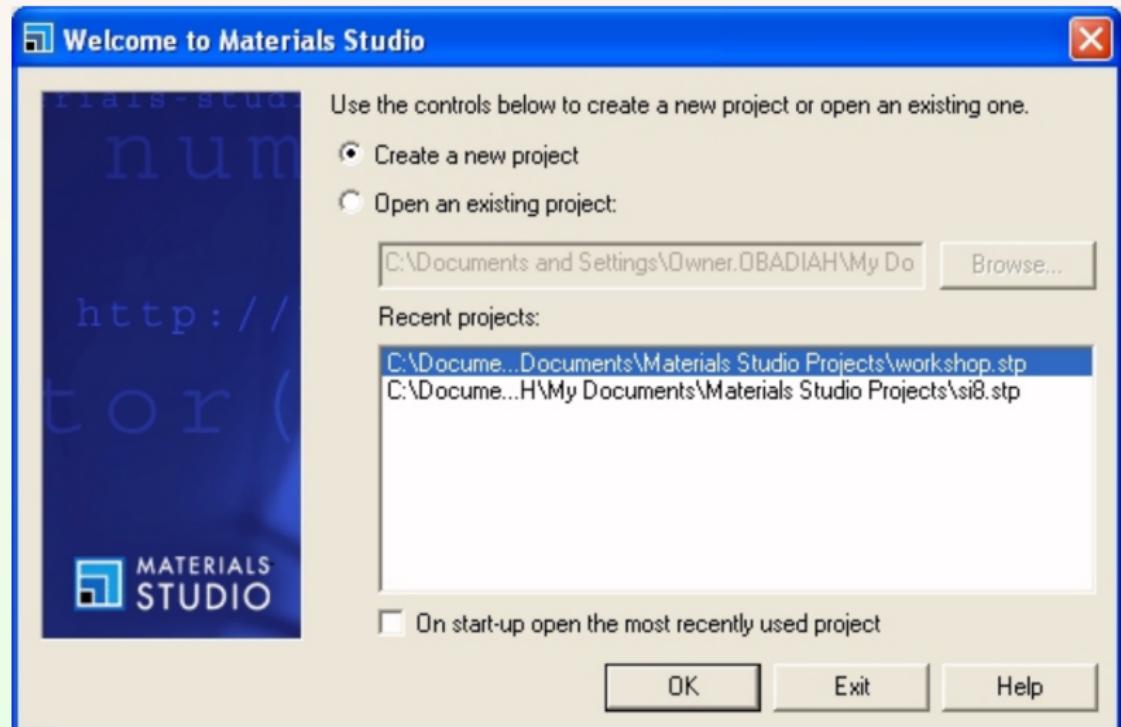


Fig. 1 Quick Start for Materials studio, Step 01

# MS: Quick Start-02

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

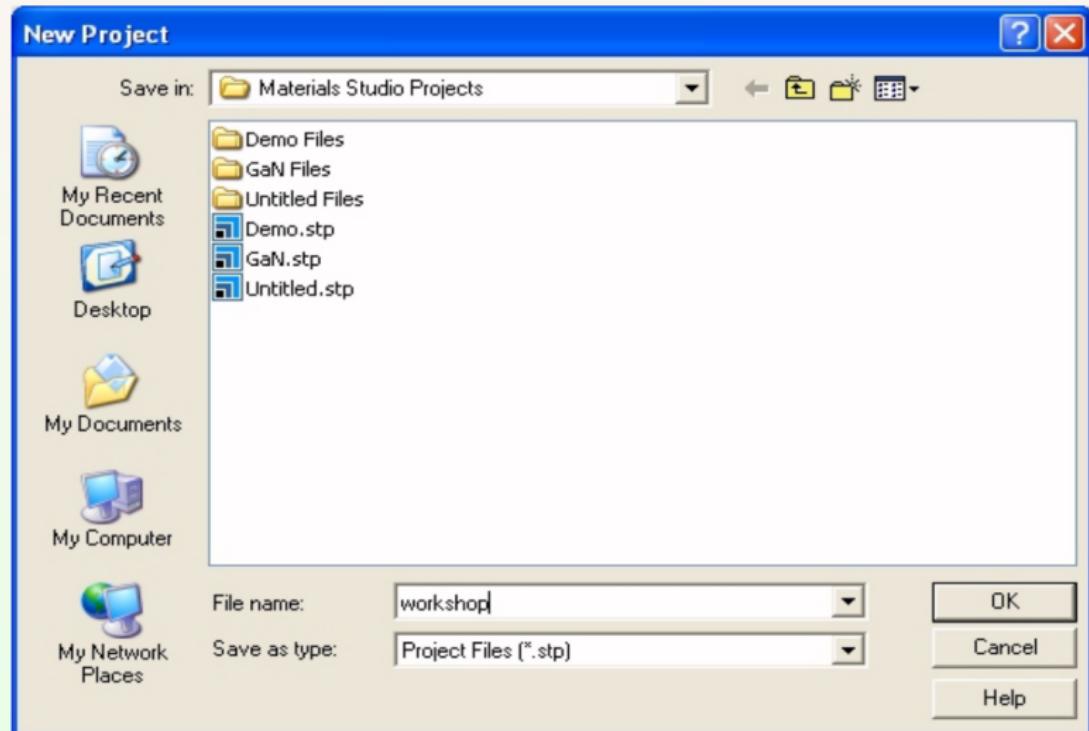


Fig.: Quick Start for Materials studio: Step-02.

# MS: Quick Start-03

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

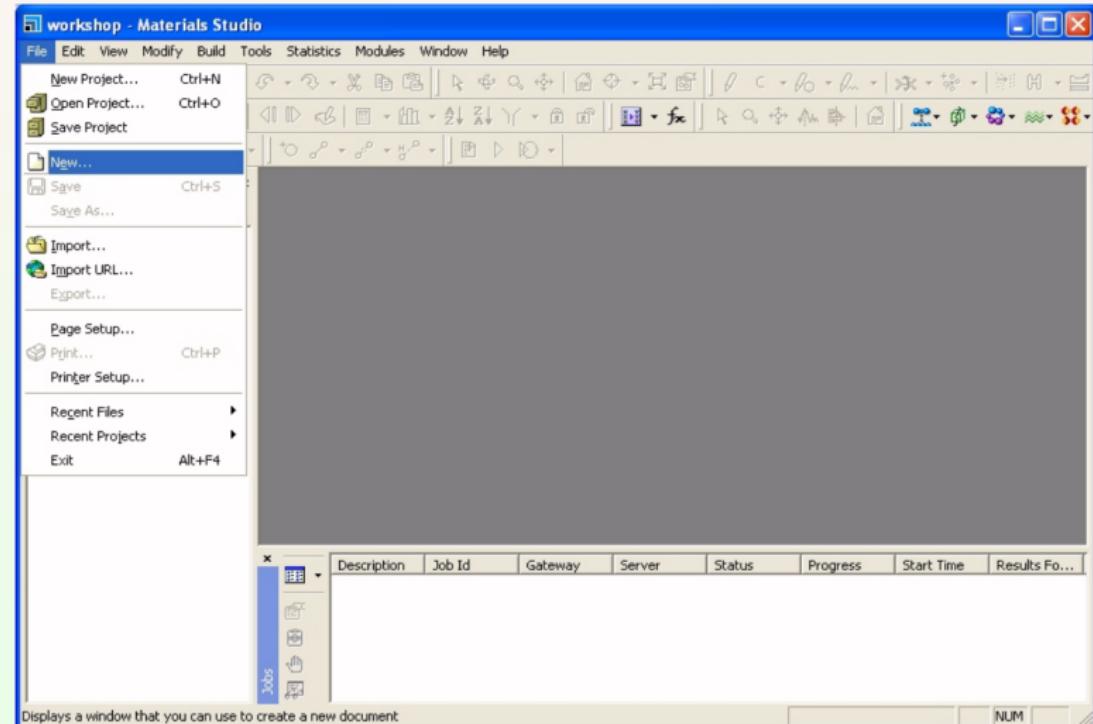


Fig.: Quick Start for Materials studio: Step-03.

# MS: Quick Start-Modelling-01

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

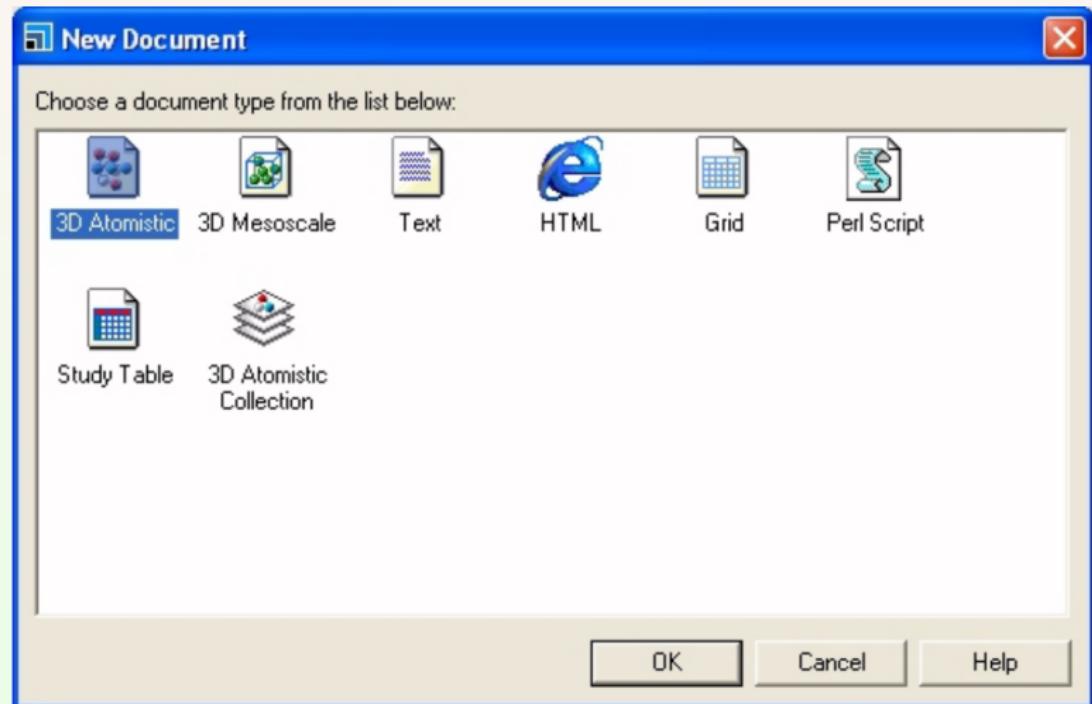


Fig.: Quick Start for Materials studio: Modelling-01.

# MS: Quick Start-Modelling-02

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

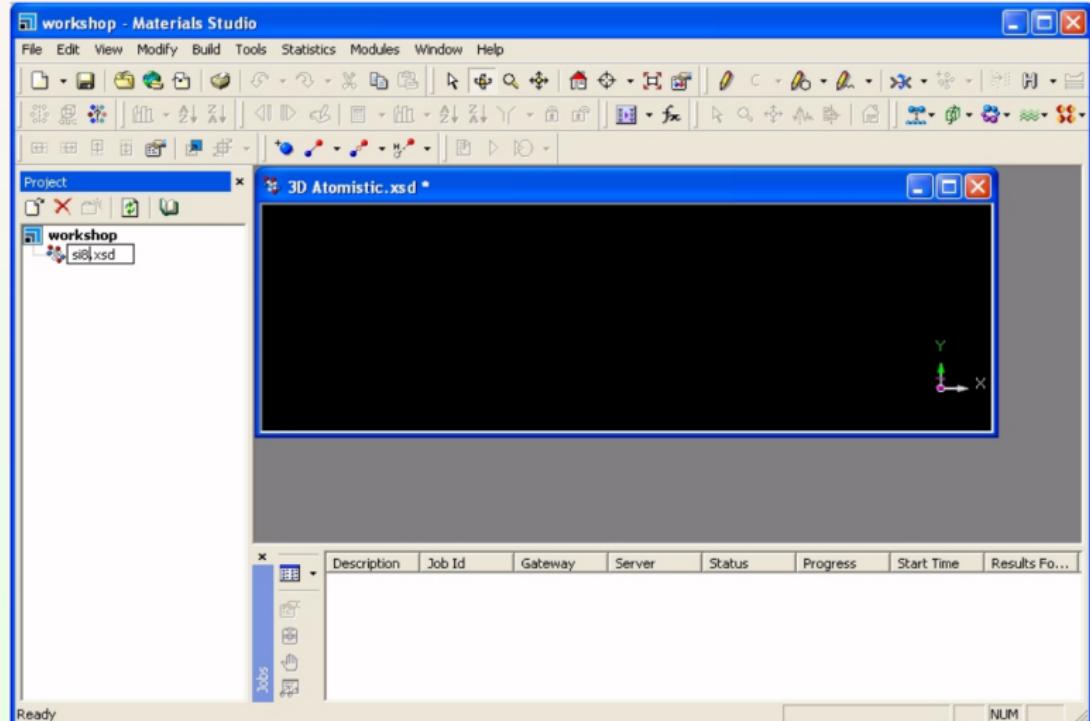


Fig.: Quick Start for Materials studio: Modelling-02.

# MS: Modelling Crystal-01

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

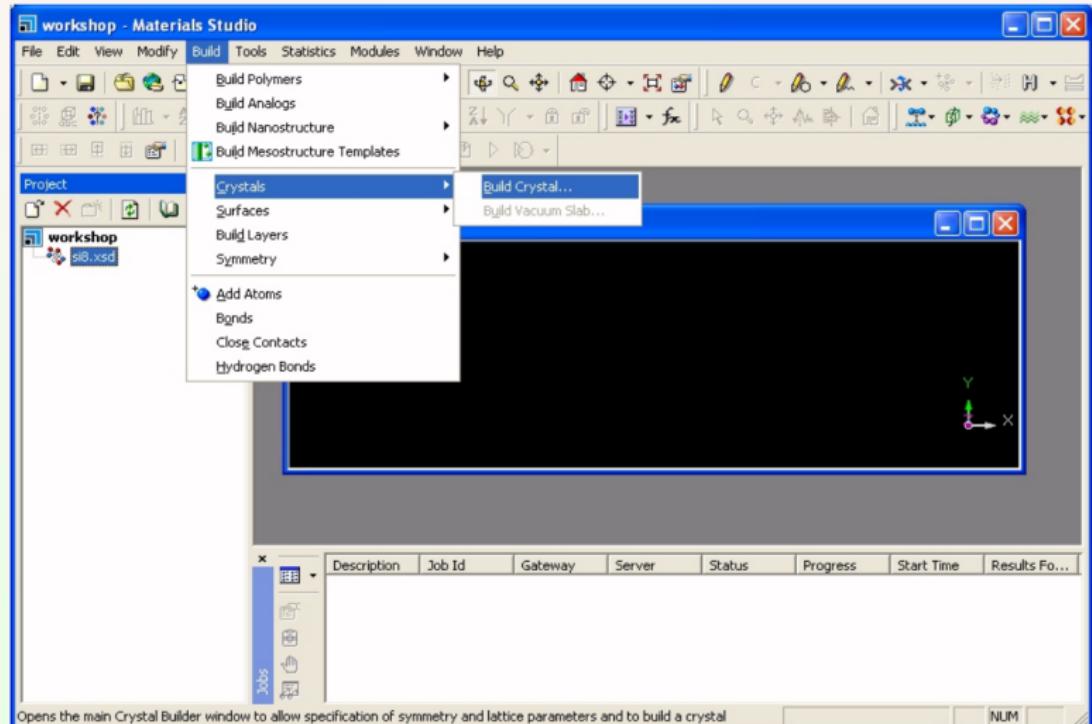


Fig.: Modelling crystal by Materials studio.

# MS: Modelling Crystal-02

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $k$  空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

SI 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

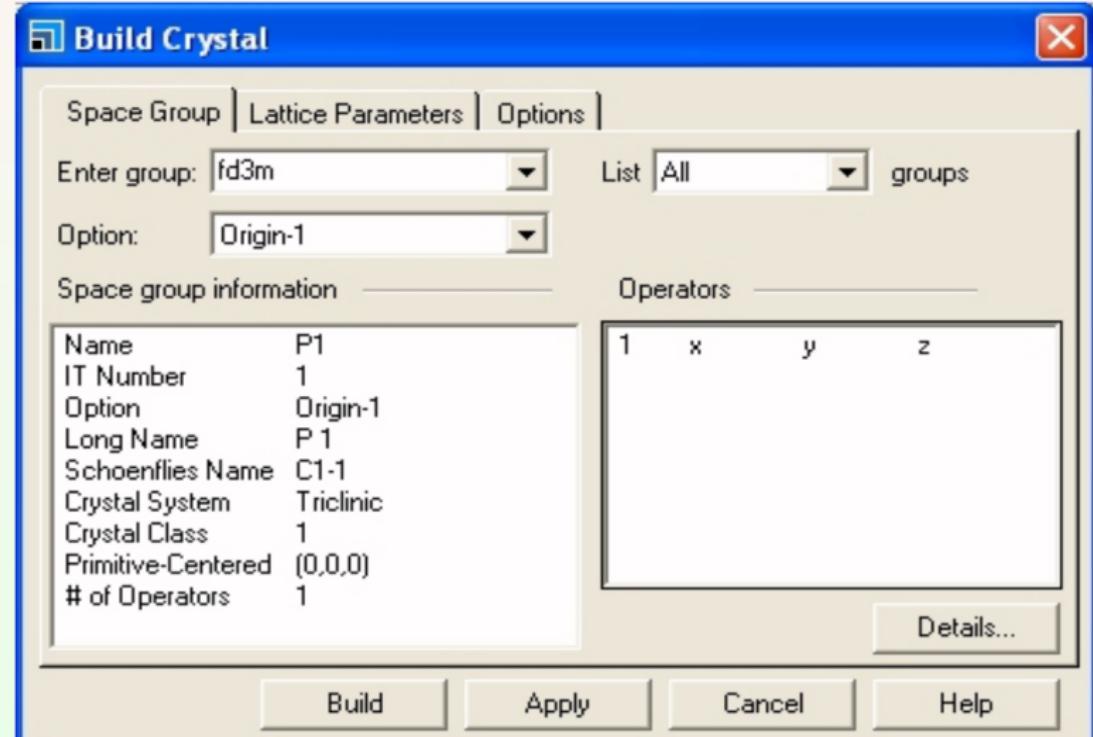


Fig.: Modelling crystal by Materials studio: Parameters.

# MS: Modelling Crystal-03

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials Studio  
为例

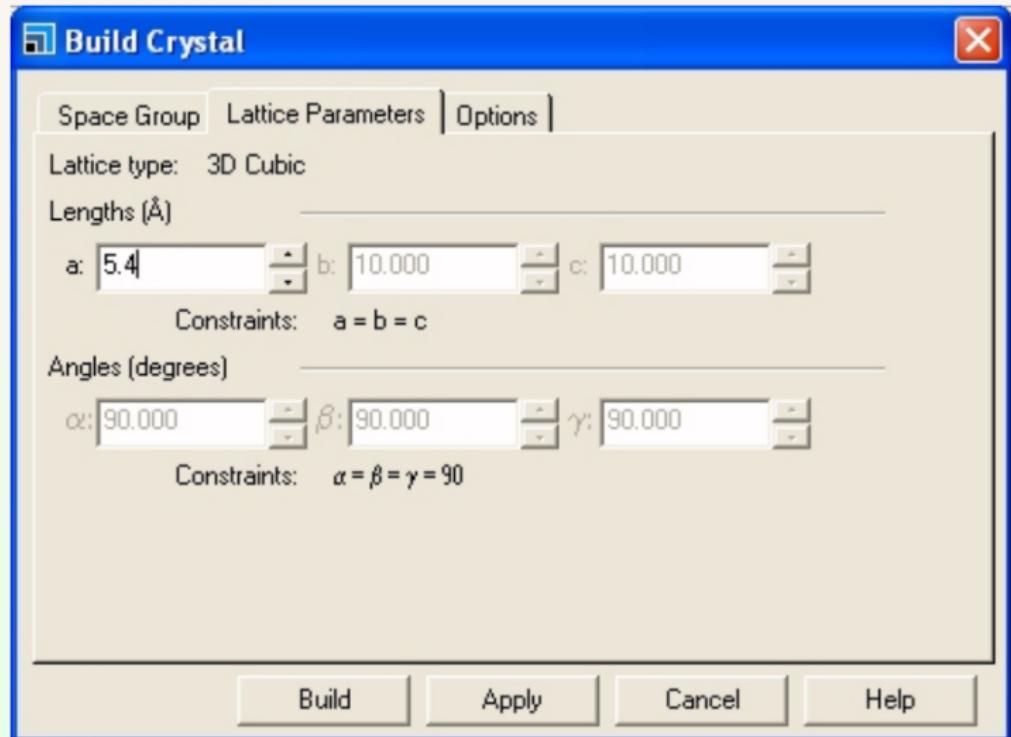


Fig.: Modelling crystal by Materials studio: Lattice parameters.

# MS: Modelling Crystal-04

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 恒密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

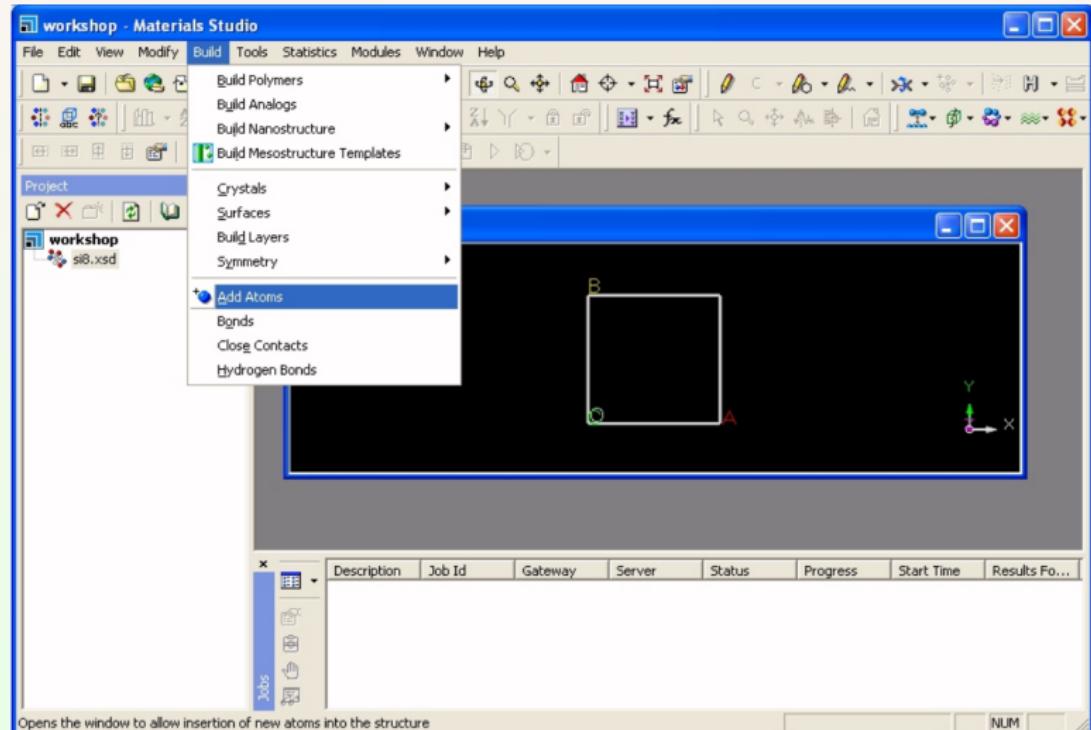


Fig.: Modelling crystal by Materials studio: Elements.

# MS: Modelling Crystal example: Si

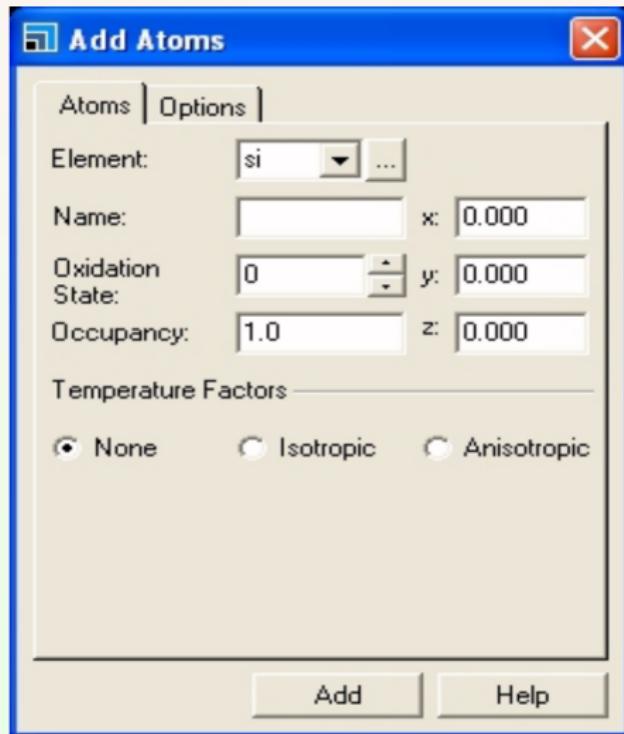


Fig.: Modelling crystal by Materials studio: Si.

# MS: Modelling Crystal example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $\vec{k}$  空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

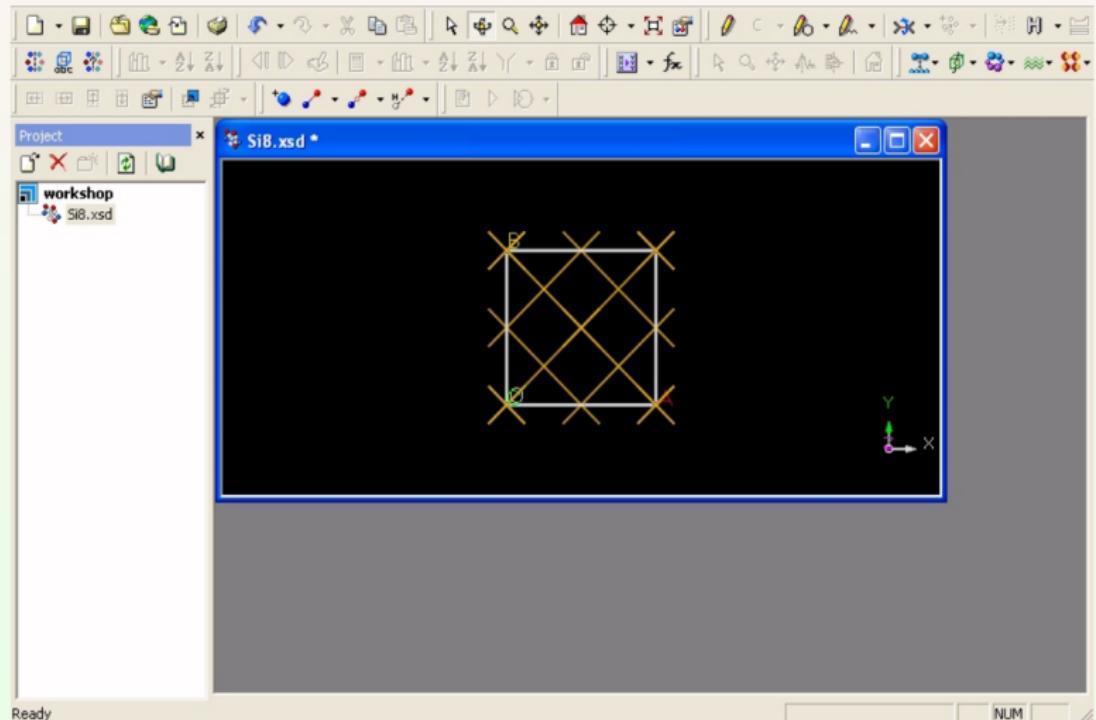


Fig.: Modelling crystal by Materials studio: Si.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $k$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

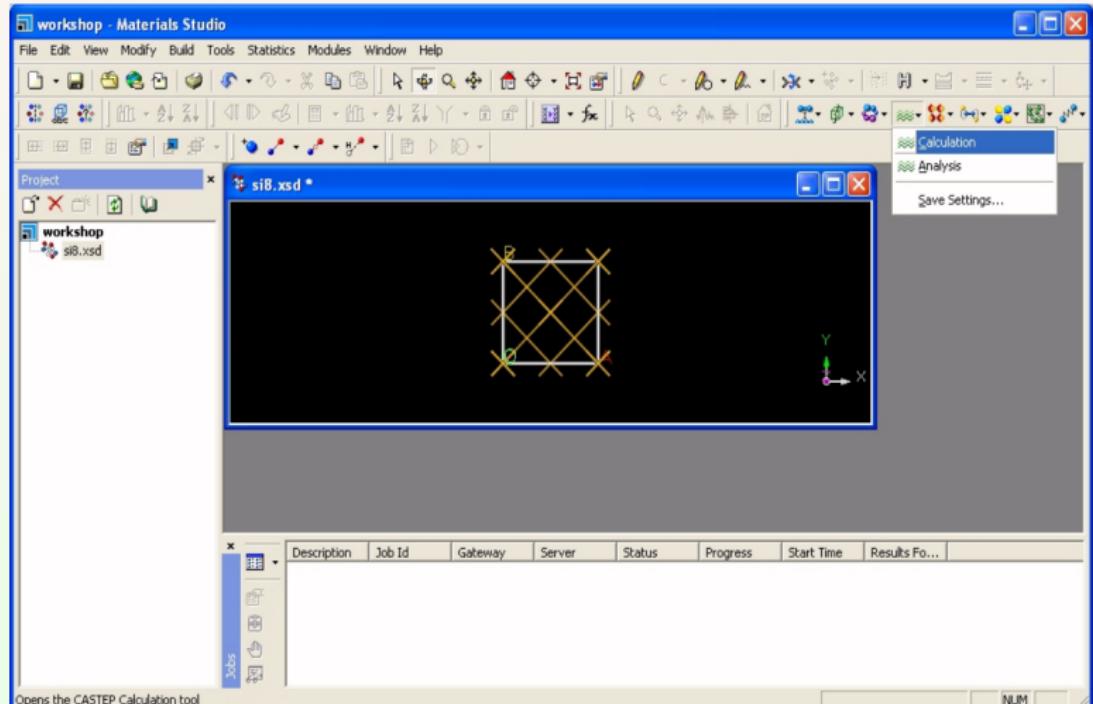


Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: Si.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

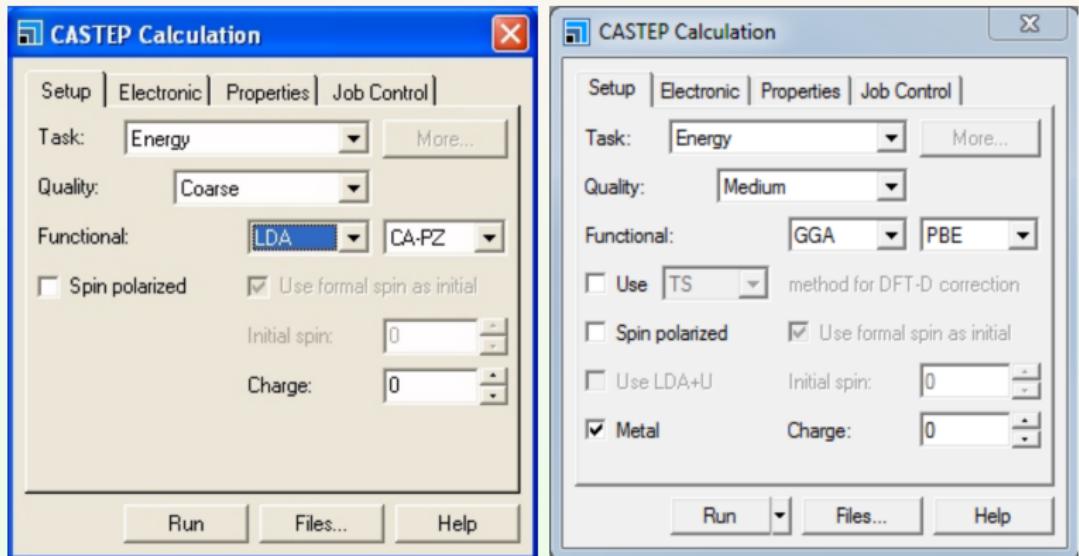


Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: Parameter.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $k$  空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

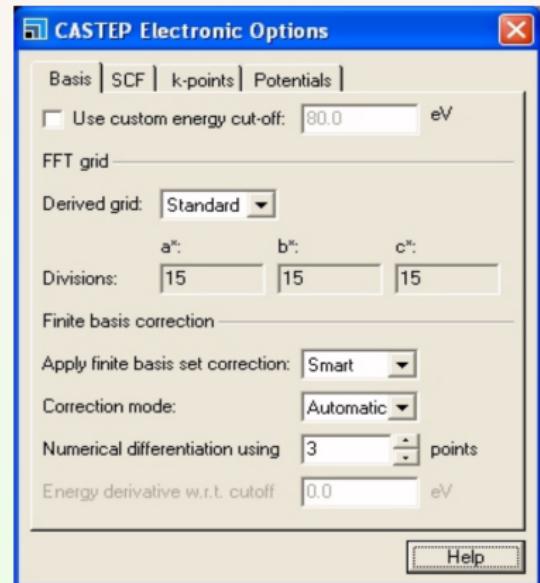
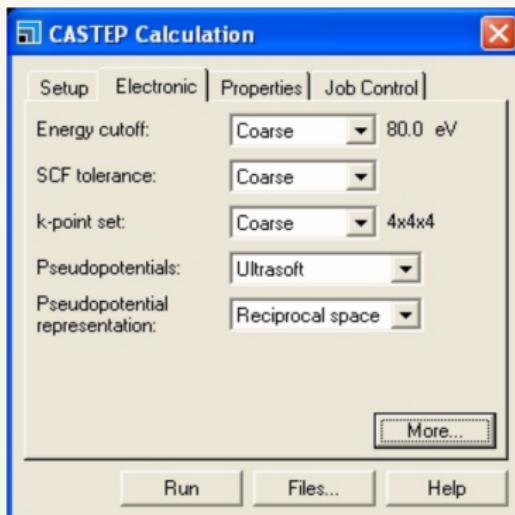


Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: Electron-step.

# MS: CASTEP Calculation example: Si



材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例  
密度泛函理论  
从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

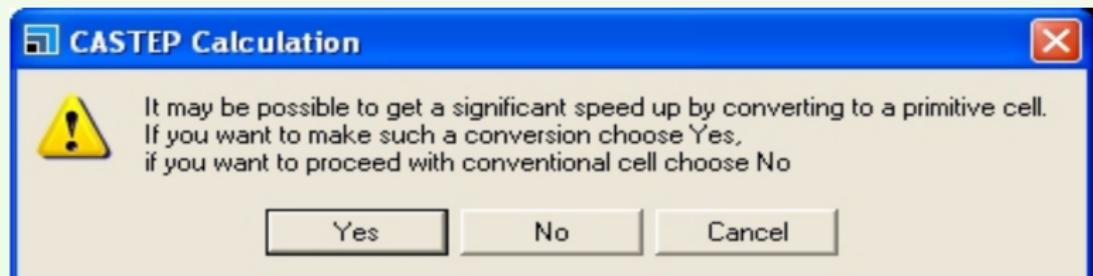
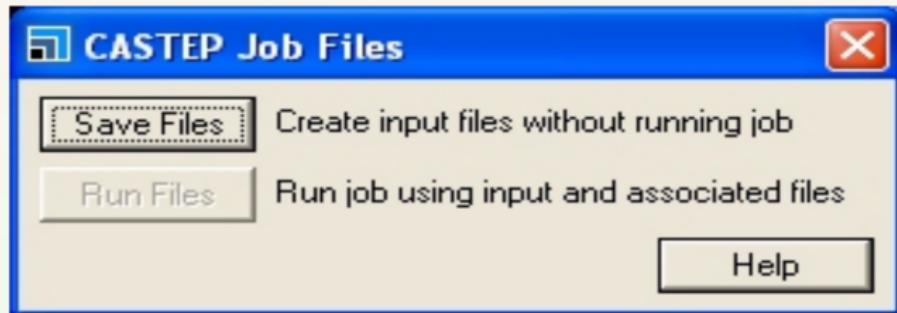


Fig.: CASTEP Calculation.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
F 空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例



Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: Connect to localhost, 

# MS: CASTEP Calculation example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
及 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

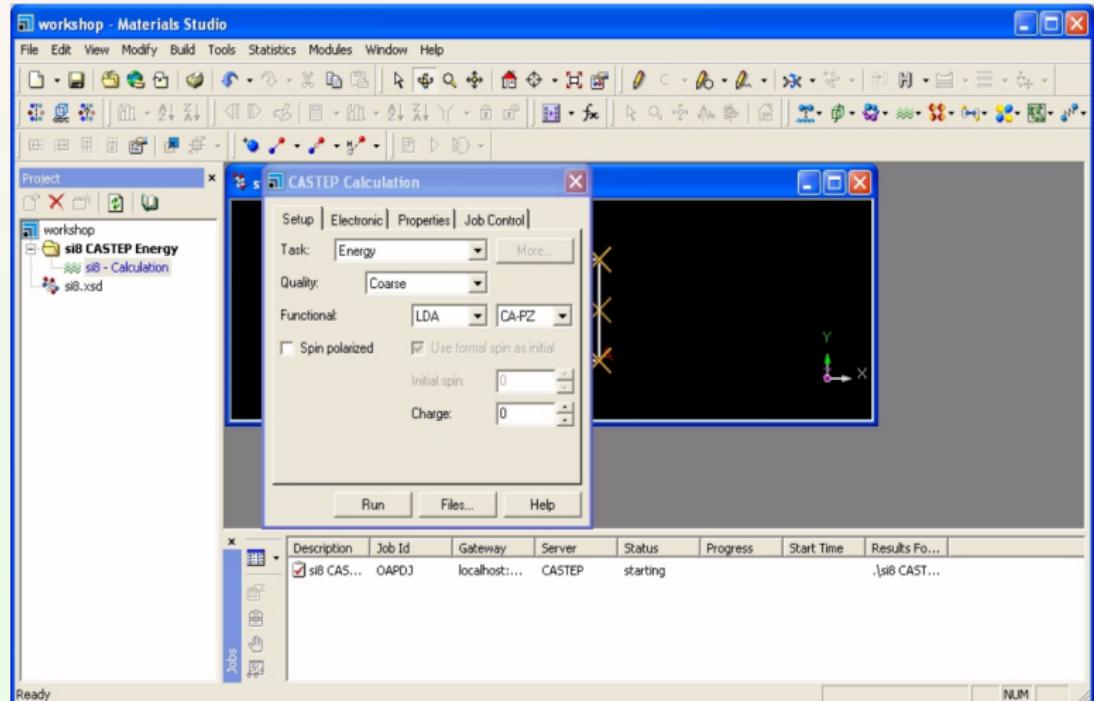


Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: Run.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
 $K$  空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi-  
als Studio  
为例

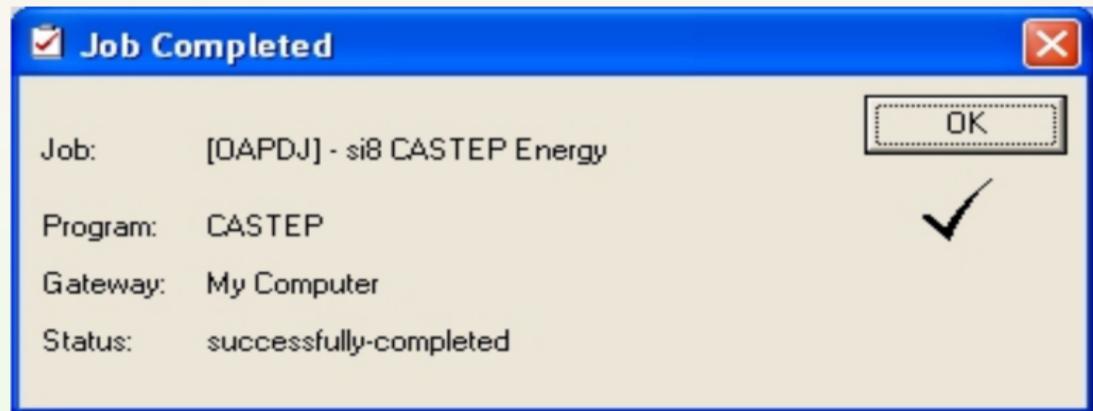


Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: Complete.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
及 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

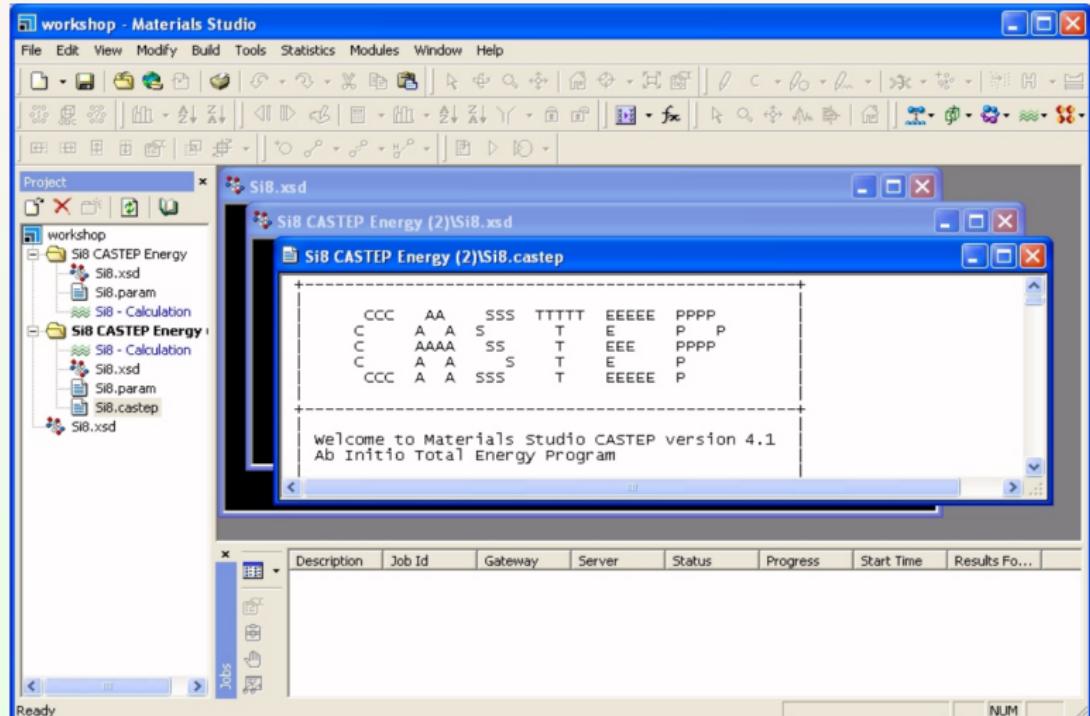


Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio; Finish.

# MS: CASTEP Calculation example: Si

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现

$k$  空间布点与积分

计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materials  
Studio 为例

SCF loop	Energy	Fermi energy	Energy gain per atom	Timer (sec)	<-- SCF
Initial	2.11973065E+002	4.85767974E+001		0.61	<-- SCF
Warning: There are no empty bands for at least one kpoint and spin; this may slow the convergence and/or lead to an inaccurate groundstate.					
If this warning persists, you should consider increasing nextra_bands and/or reducing smearing_width in the param file.					
Recommend using nextra_bands of 7 to 15.					
1	-7.22277610E+002	1.02240172E+001	1.16781334E+002	0.88	<-- SCF
2	-8.53739673E+002	6.90687627E+000	1.64327579E+001	1.12	<-- SCF
3	-8.62681938E+002	6.65069587E+000	1.11778315E+000	1.39	<-- SCF
4	-8.62169156E+002	6.69758744E+000	-6.40977798E-002	1.72	<-- SCF
5	-8.61880601E+002	6.78641872E+000	-3.60693332E-002	2.06	<-- SCF
6	-8.61884687E+002	6.79549194E+000	5.10791707E-004	2.44	<-- SCF
7	-8.61884645E+002	6.79874201E+000	-5.25062118E-006	2.75	<-- SCF
8	-8.61884639E+002	6.79822409E+000	-8.40318139E-007	2.98	<-- SCF
<-- SCF					
Final energy, E = -861.8846385210 eV					
Final free energy (E-TS) = -861.8846385210 eV					
(energies not corrected for finite basis set)					
NB est. OK energy (E-0.5TS) = -861.8846385210 eV					

Fig.: CASTEP Calculation by Materials studio: SCF.

# MS: CASTEP Analysis example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
F 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

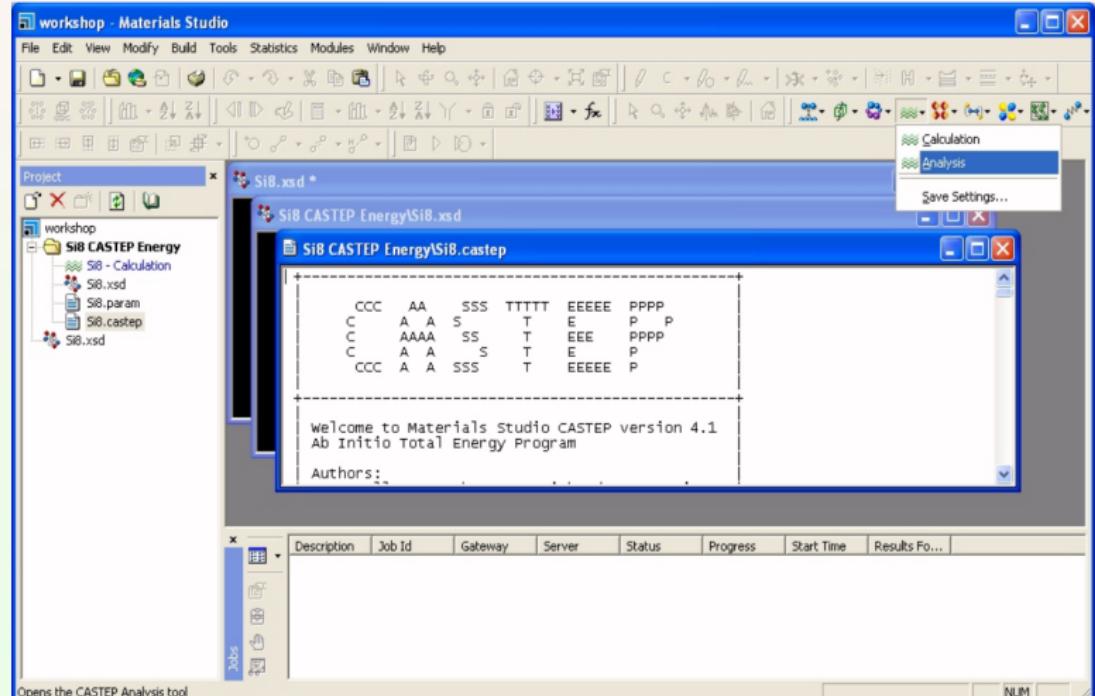


Fig.: CASTEP Analysis by Materials studio.

# MS: CASTEP Analysis example: Si

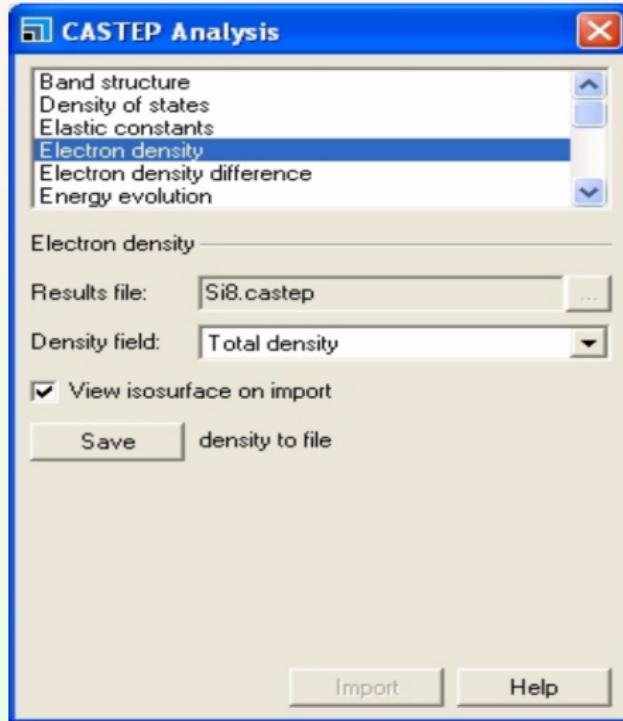


Fig.: CASTEP Analysis by Materials studio: Parameter,

# MS: CASTEP Analysis example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

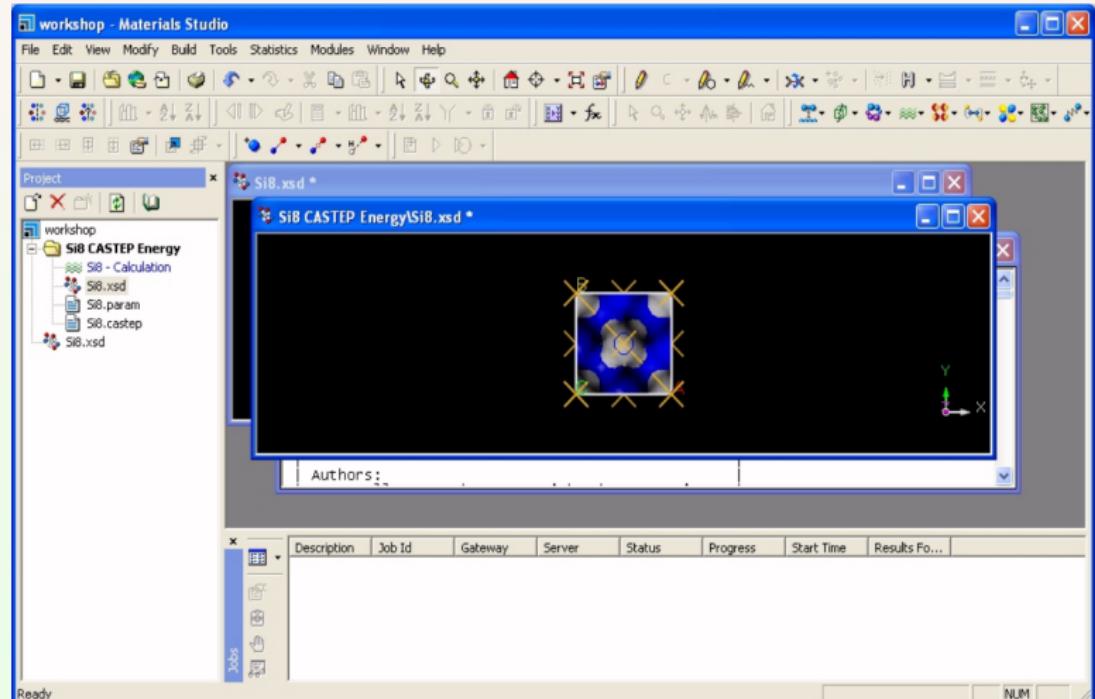


Fig.: CASTEP Analysis by Materials studio: Charge.

# MS: CASTEP Analysis example: Si

材料模拟软件  
与方法简介  
(I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
→ 空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

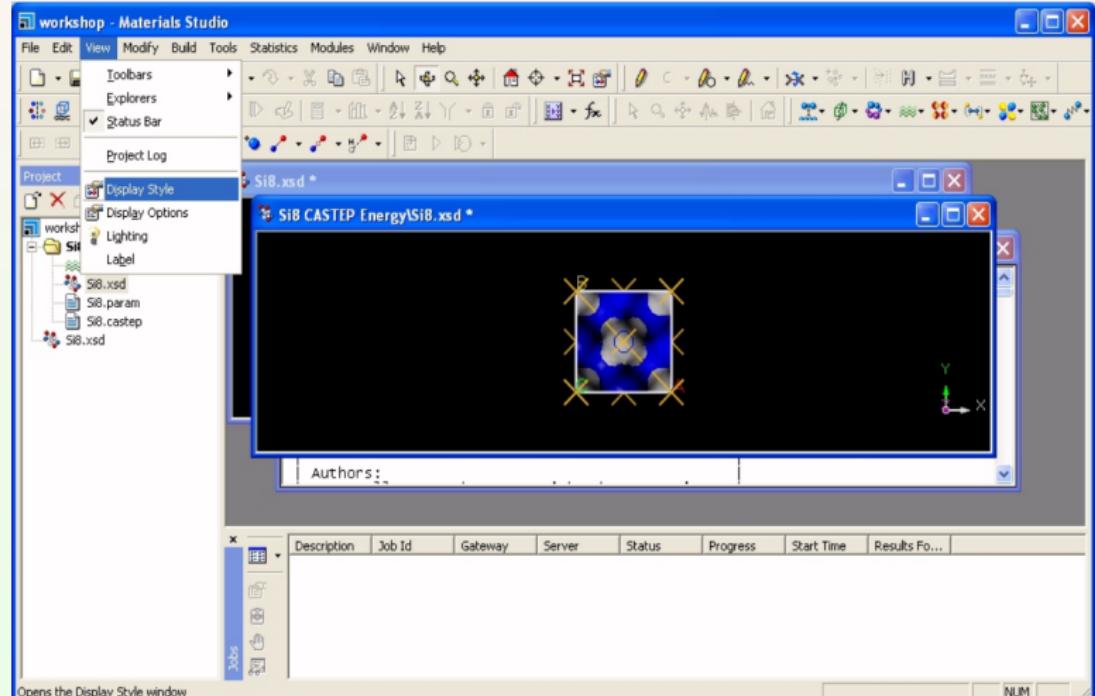


Fig.: CASTEP Analysis by Materials studio: Display-style.

# MS: CASTEP Analysis example: Si

## 材料模拟软件与方法简介 (I)

从理论到计算  
软件: 以  
DFT 为例

密度泛函理论

从理论到软件的实现  
空间布点与积分  
计算方法与软件分类

软件解方  
程: 迭代与优  
化

计算示  
例: VASP

VASP 计算  
示例

Si 的电子结构: 态密  
度与能带

材料模拟基  
础: 建模——  
以 Materi  
als Studio  
为例

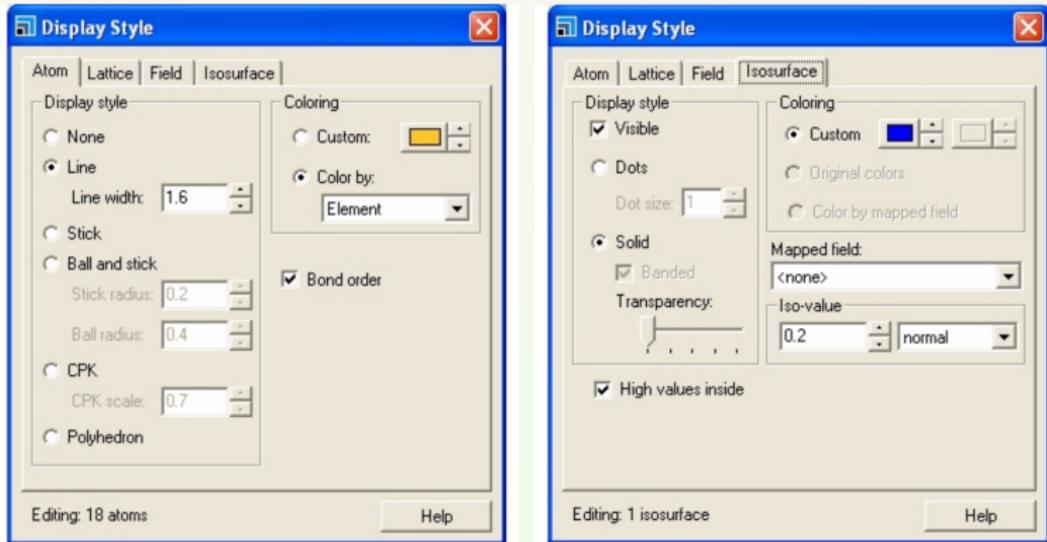


Fig.: CASTEP Analysis by Materials studio: Display-parameter.

# DFT 之歌

## The DFT Song

written by Volker Blum and Kieron Burke

to the tune of "Let It Be" (with apologies to John and Paul)

When I find my model's unpredictable,  
Walter Kohn just comes to me,  
speaking words of wisdom,  
DFTee.

And in my hour of code-debugging,  
he stands right in front of mee,  
saying "you just gotta learn  
your chemistree".

LSD, PBE,  
B3LYP, hee-hee-hee.  
Which approximation should I use,  
in my DFT?

For though it may be parted  
with hybrid E-X-Cee,  
Can I trust my answer,  
in realitee?

DFT, DFT,  
DFT, DFTee.  
I thought you were first principles,  
DFTee.

And when the broken-hearted gap,  
opens up to full degree,  
How'll I get the answer,  
tell me DFTee?

And when I find my state's degenerate,  
I turn next to Mel Levy  
Constrained searches work the best  
for formality.

In LDA I have some faith,  
if my system's running free  
But LDA can never give  
A dis-Cont-inuit-eee.

DFT, convexity,  
Not Thomas-Fermi, nor Hartree-ee  
Exact conditions tell the truth,  
no fitting need there be.

And in my hour of darkness,  
with van-der-Waals in front of mee,  
my graphene comes out bad,  
with stupid PBEee.

For though the band gap may be parted,  
there's a chance that you will see:  
GW is the answer,  
thank you, Rex Godbee!

Many bod-eee, not DFT,  
Many bod-eee, no densitee,  
this must be the answer,  
on which we'll all agree!

And when I've found the structure,  
there's still a light that shines on me,  
So Walter wont let me use,  
ground-state DFTee.

To find the optical spectrum,  
while staying p'rameter-free,  
We must ask a little Gross,  
the one called Hardeee.

## 材料模拟软件 与方法简介 (I)

But now there's Langreth-Lundqvist,  
doing even ATPee,  
let's all go to medical conferences,  
running DFTee.

DFT, DFT,  
DFT, DFTee.  
I can always find a functional,  
to make it all agree.

But when my band gap's tiny,  
far to small to see,  
I don't like your answer,  
DFTee.

DFT, 123,  
now TD-, DFT  
Let's get excitations,  
with more skulduggeree.

DFT, DFT,  
DFT, DFTee.  
It's the weirdest physics,  
but makes great chemistreee!

谢谢大家！