



基于 DFT 的第一原理计算方法简介

E-mail: czjiangjun@yeah.net

2021.12



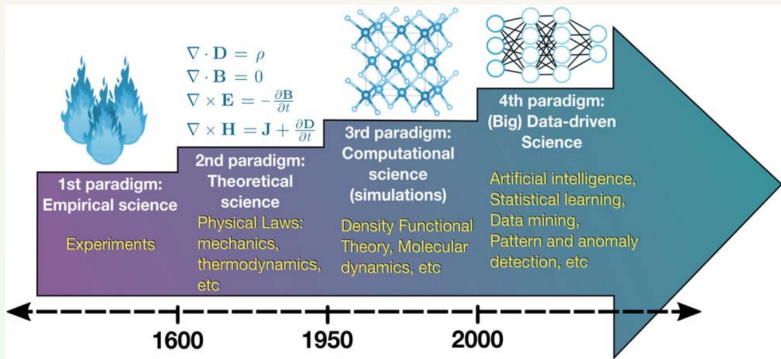
1 引言

科学研究的范式



基于 DFT 的
第一原理计算
方法简介

引言



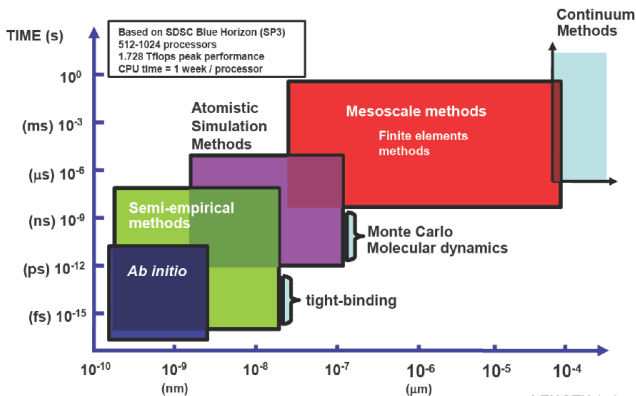
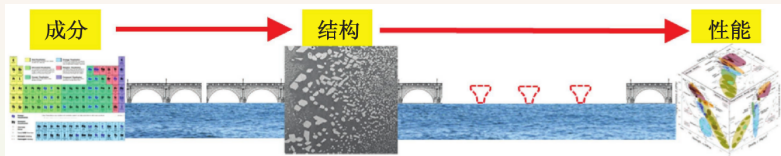
图片引自文献 [1]

材料模拟的基本思想和方法



基于 DFT 的
第一原理计算
方法简介

引言



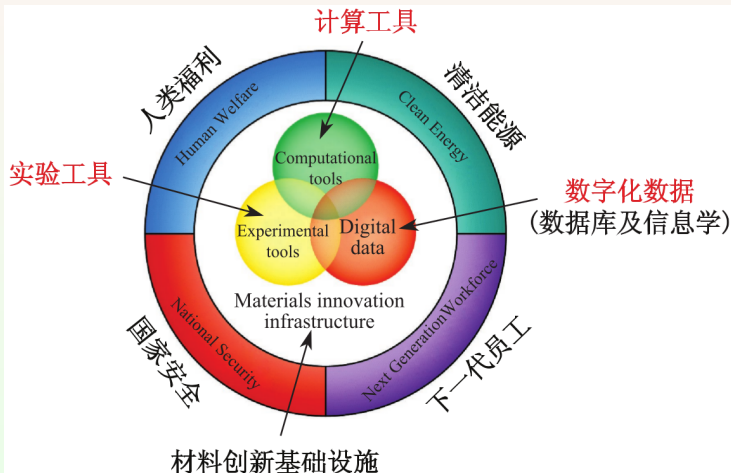
基于 DFT 的第一原理计算方法简介

材料模拟的作用与地位



基于 DFT 的
第一原理计算
方法简介

引言



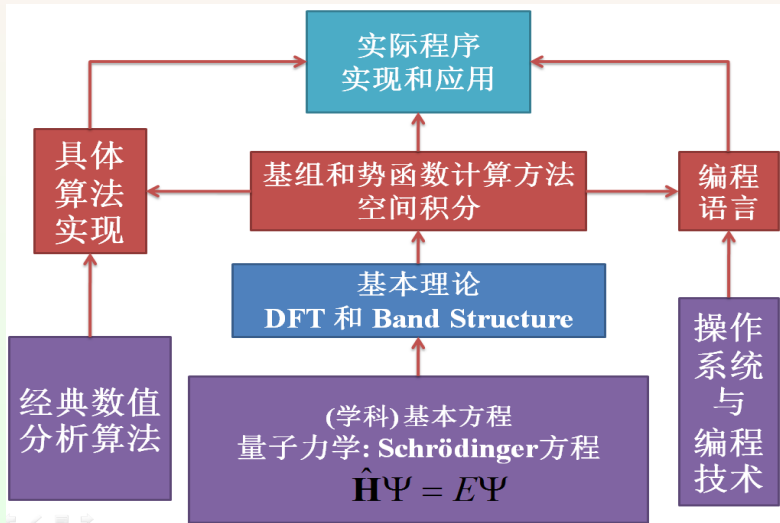
图片引自文献 [2]

基本原理-理论-方法-计算软件

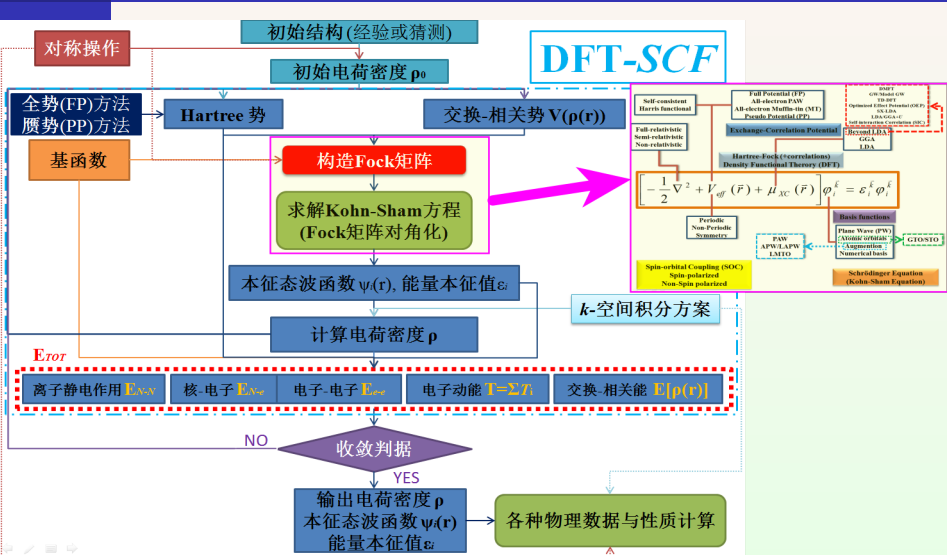


基于 DFT 的
第一原理计算
方法简介

引言



DFT-SCF

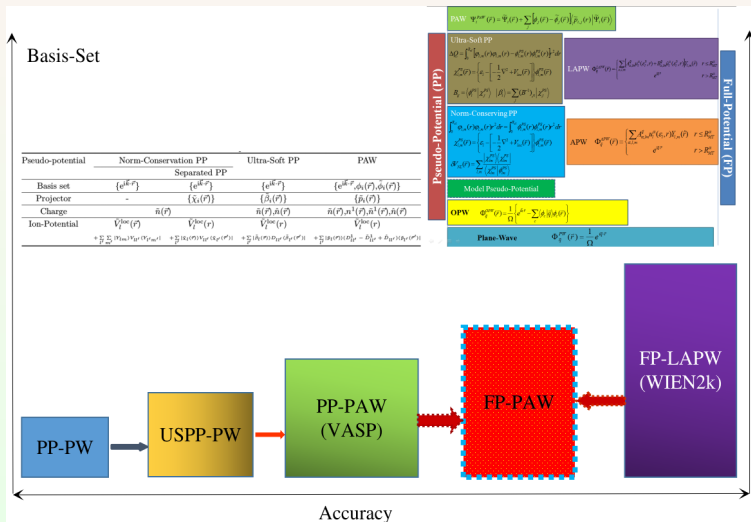


各种计算方法的关系



基于 DFT 的第一原理计算方法简介

引言



主要参考文献



基于 DFT 的
第一原理计算
方法简介

引言

- [1] G. R. Schleder, A. C. M. Padilha, C. M. Acosta, M. Costa, and A. Fazzio, *J. Phys. Mater.* **2**, 032001 (2019).
- [2] J.-C. Zhao(赵继成), 自然杂志 **36**, 89 (2014).