

t u nh n

## Chương 5 Một số phép tính cơ bản của DFT

5.1 Tối ưu hóa cấu trúc điện tử

5.2 Tối ưu hóa cấu trúc hình học

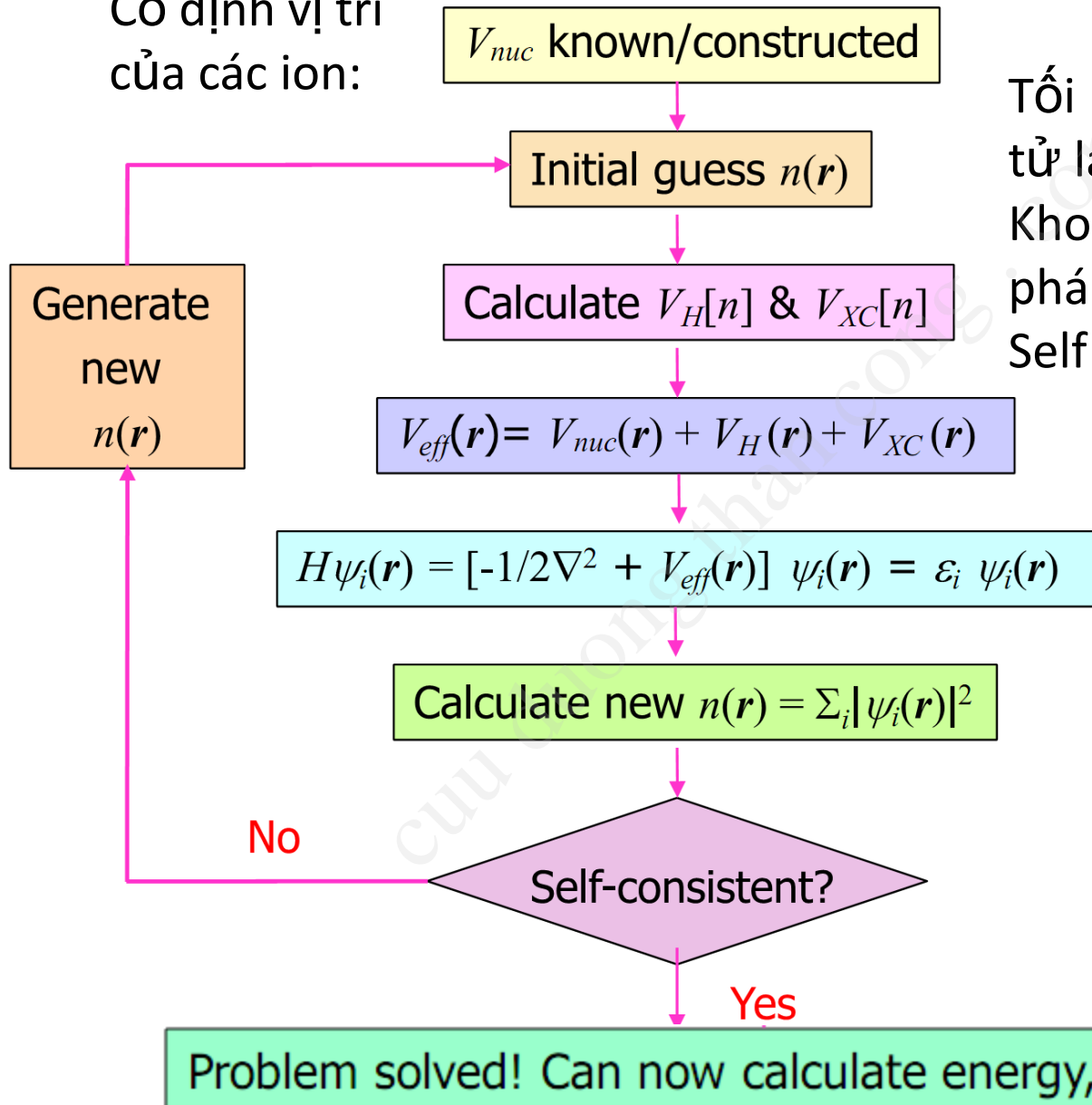
5.3 Các phép xử lý hậu kỳ

5.4 Giới thiệu về code Quantum ESPRESSO

<http://www.quantum-espresso.org/>

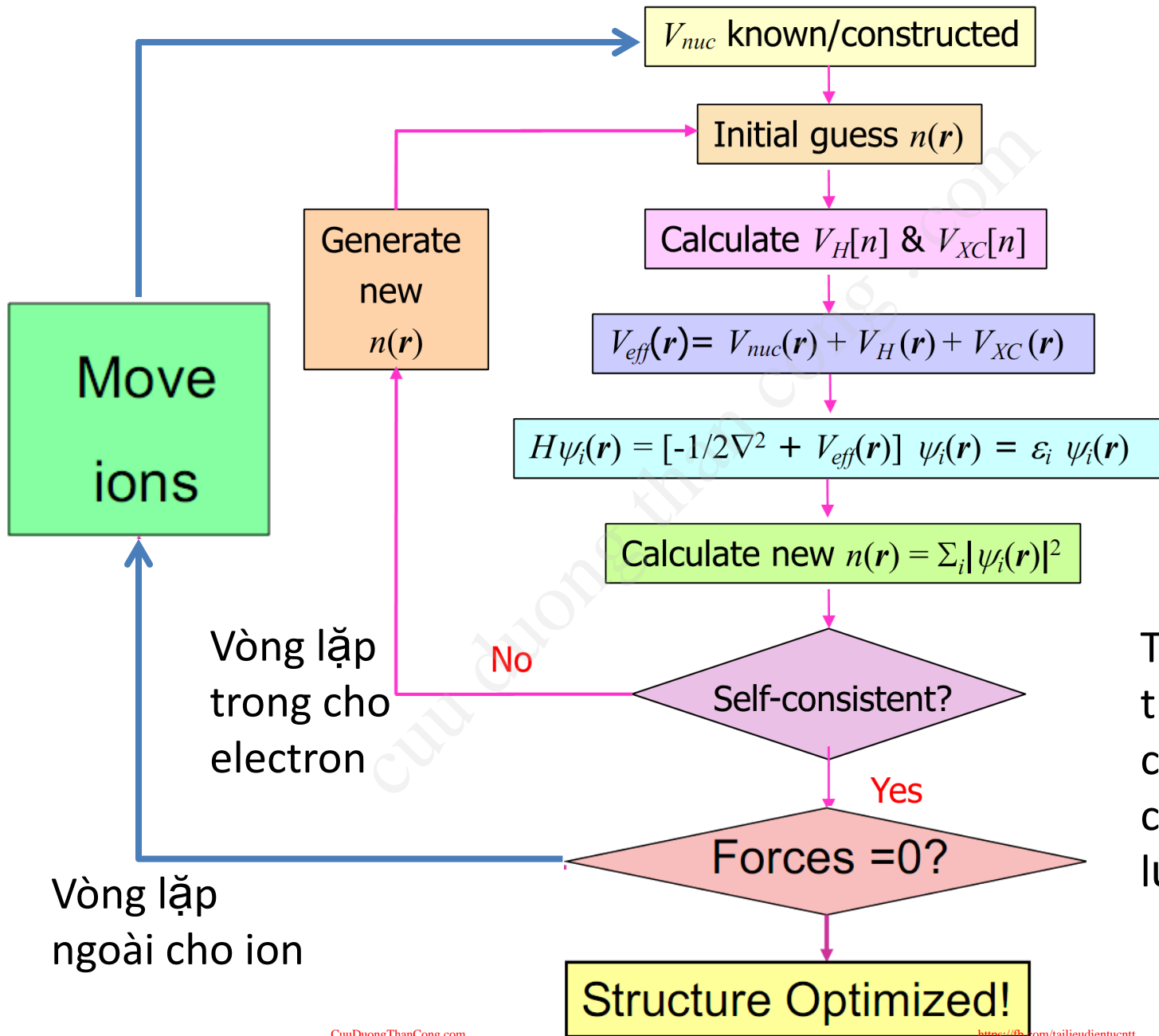
## 5.1 Tối ưu hóa cấu trúc điện tử

Cố định vị trí  
của các ion:



Tối ưu hóa cấu trúc điện tử là việc giải phương trình Khon-Sham bằng phương pháp lặp (trường tự hợp – Self-consistent field SCF)

## 5.2 Tối ưu hóa cấu trúc hình học



Tối ưu hóa cấu trúc: Tìm vị trí của ion và unit cell sao cho năng lượng cực tiểu

# Tính toán lực tác dụng lên ion

Use **force (Hellmann-Feynman) theorem**:

- Want to calculate the force on ion  $I$ :

$$\mathbf{F}_I = -\frac{d}{d\mathbf{R}_I} \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

- Get three terms:

$$\mathbf{F}_I = -\langle \Psi | \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_I} | \Psi \rangle - \langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{R}_I} | H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H | \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{R}_I} \rangle$$

When  $|\Psi\rangle$  is an eigenstate,  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

• The **force** is now given by

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_I &= -\langle \Psi | \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_I} | \Psi \rangle - E \langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{R}_I} | \Psi \rangle - E \langle \Psi | \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{R}_I} \rangle \\ &= -\langle \Psi | \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_I} | \Psi \rangle - E \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_I} \langle \Psi | \Psi \rangle \end{aligned}$$

0

Tại vị trí cân  
bằng của ion:

$$\mathbf{F}_I \equiv -\frac{\partial E(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_I} = 0$$

## Trạng thái cân bằng của unit cell

Các hằng số mạng:  $\mathbf{h} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]$

Sự thay đổi hằng số mạng:  $\mathbf{h}' = (\mathbf{I} + \epsilon)\mathbf{h}$      $\epsilon$  : Tensor biến dạng

Tensor Ứng suất:  $\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial E}{\partial \epsilon_{\alpha\beta}}$

$\Omega = \det \mathbf{h}$  : Thể tích unit cell

Unit cell ở trạng thái cân bằng (có năng lượng cực tiểu):

$$\mathbf{P}_{unitcell} = \mathbf{P}_{ext} - \sigma \mathbf{I} \approx 0$$

$\mathbf{P}_{ext}$  : Áp suất bên ngoài tác dụng lên unit cell

Hoặc unit cell ở trạng thái  
năng lượng cực tiểu:  $\frac{dE}{d\Omega} = 0$

## Một số phương pháp tối ưu hóa cấu trúc:

1. Phương pháp trực dốc (Steepest Descent)
2. Phương pháp Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno (**BFGS**)
3. Phương pháp dập tắt động lực học (Damped Molecular Dynamics)

.....

## 5.3 Các phép xử lý hậu kỳ

1. Tính toán cấu trúc vùng năng lượng
2. Tính toán mật độ trạng thái (DOS) hoặc hình chiếu mật độ trạng thái (PDOS)
3. Ảnh STM trên bề mặt
4. Hiển thị các orbital (mật độ điện tích)
5. Phonon
6. ....