i) Software tínhtoán DFT: Quantum ESPRESSO code (QE), "http://www.quantum-espresso. org/"

Đườngdẫn download code: "http://qe-forge.org/gf/ project/q-e/frs/?action= FrsReleaseBrowse&frs_package_id=18&_br_pkgrls_total=50&_br_pkgrls_page=2"

Cácem download vềmáycác file :
"qe-5.2.0-32bit-serial.exe" và "qe-5.2.0-64bit-serial.exe" tươngứngchocácmáytính 32 bit và 64 bit chạytuầntự.
"qe-5.2.0-32bit-mpich2.exe" và "qe-5.2.0-64bit-mpich2.exe" tươngứngchocácmáytính 32 bit và 64 bit chạy song song. (Nếu CPU củacácemcónhiều core, nósẽchạynhanhhơn so vớichạytuầntự).

Thầygửikèmtheofile"QE-on-Windows.pdf" hướngdẫncài MPICH đểhỗtrợchạy song song.

Nếucácemkhôngcàiđượccác software chạy song songthìdùngbảnchạytuầntựcũngđược.
Khicàiđặtnêntắtcáctínhnăngbảovệcủamáytính.
Nếucácphiênbảntrênkhôngcàiđượcvàomáythìcácemcốgắngcàiđặtcácphiênbảnkháccủa QE mànằmtrongcùngđường link ở trên (http://qe-forge.org/gf/ project/q-e/frs/?action= FrsReleaseBrowse&frs_package_id=18&_br_pkgrls_total=50&_br_pkgrls_page=1), vídụnhưcácphiênbản QE-5.1 hoặc QE-5.3.

ii)Thêmnữa, cácemcầncàithêmcác software hiểnthịcấutrúc:

VESTA software: http://jp-minerals.org/vesta/ en/.
Download file "VESTA.zip" và "VESTA-win64.zip" tươngứngchocácmáytính 32 bit và 64 bit.

GaussView 5.0 software: File "GaussView 5.rar"

iii)Software edit vàxemcác file input và output chocác software ở trên: **Notepad++** :
"https://notepad-plus-plus. org/". Vàophần "https://notepad-plus-plus. org/download/v7.3.3.html" để download các file chạytrênmáy 32 bit hoặc 64 bit.
Rấtchú ý làcácemluônphảidùng Notepad++ để edit vàxemcác file input và output củacác software trên. Khôngđượcdùngcác software khácnhư Microsoft Office Word, Notepad, WordPad ,.... chocácviệcnày. Vìchúngsẽphátsinhrấtnhiềulỗiđịnhdạngchocác file.

Cácem download các software vềrồiphảicốgắngtựcàichúngvàomáynhé, thầykhôngdànhnhiềuthờigianchoviệctrênlớpnàyđược.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt