

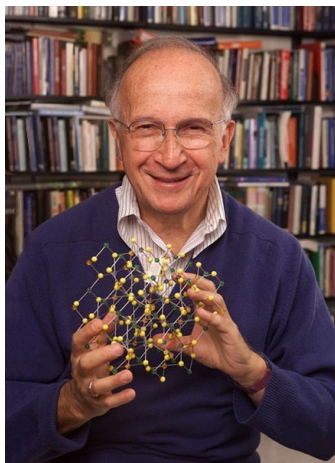
Комп'ютерне моделювання електронних властивостей матеріалів



Лабораторна робота 2 Розрахунок зонної структури

Олег Фея, к.ф-м.н

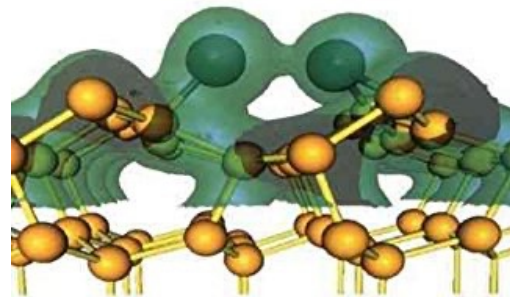
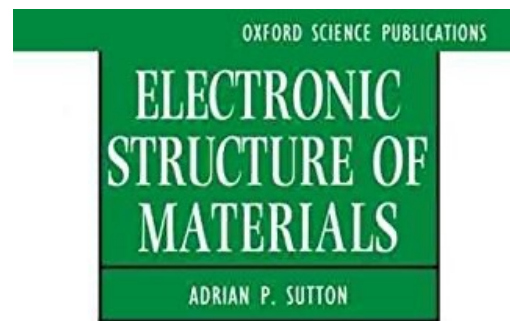
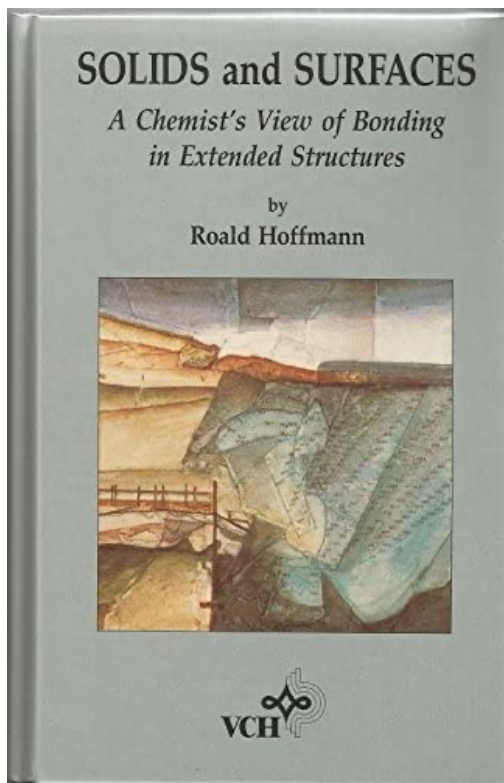
САКРАЛЬНІ ЗНАННЯ



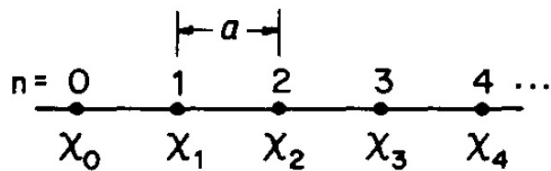
Роалд Гоффман
Золочів, 1937



Хімія, 1981



ЗОННА СТРУКТУРА ЛАНЦЮЖКА АТОМІВ



$$\psi_k = \sum_n e^{ikna} \chi_n$$

$$k=0 \quad \psi_0 = \sum_n e^0 \chi_n = \sum_n \chi_n$$

$$= \chi_0 + \chi_1 + \chi_2 + \chi_3 + \dots$$

Diagram for $k=0$ showing all atoms with positive phase (hatched circles).

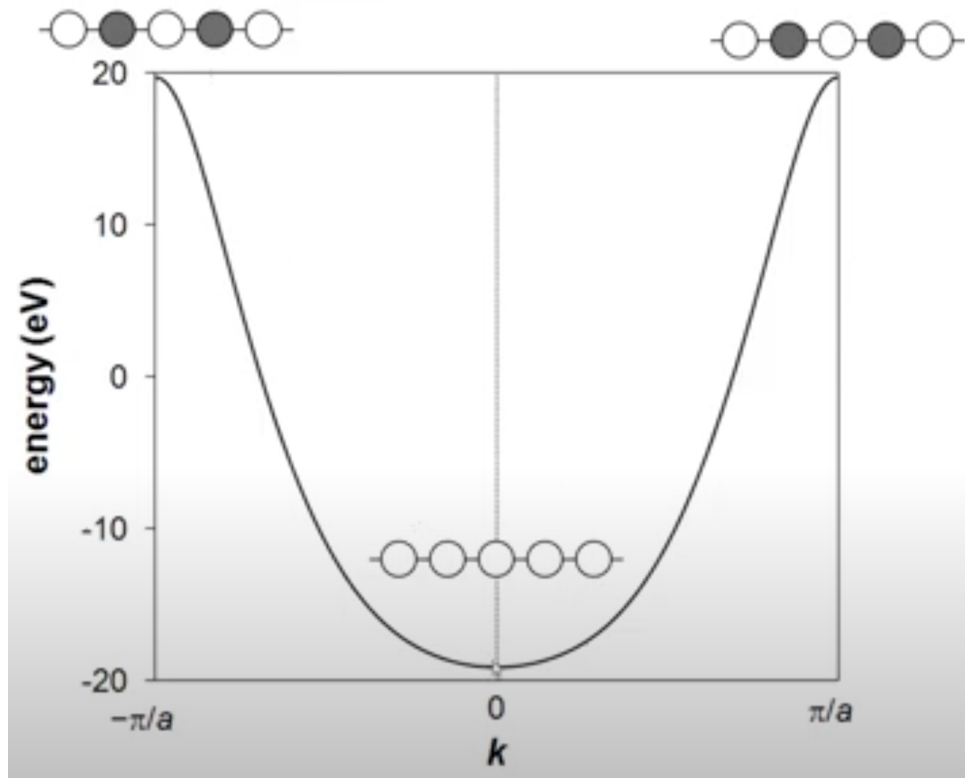
$$k=\frac{\pi}{a} \quad \psi_{\frac{\pi}{a}} = \sum_n e^{\pi in} \chi_n = \sum_n (-1)^n \chi_n$$

$$= \chi_0 - \chi_1 + \chi_2 - \chi_3 + \dots$$

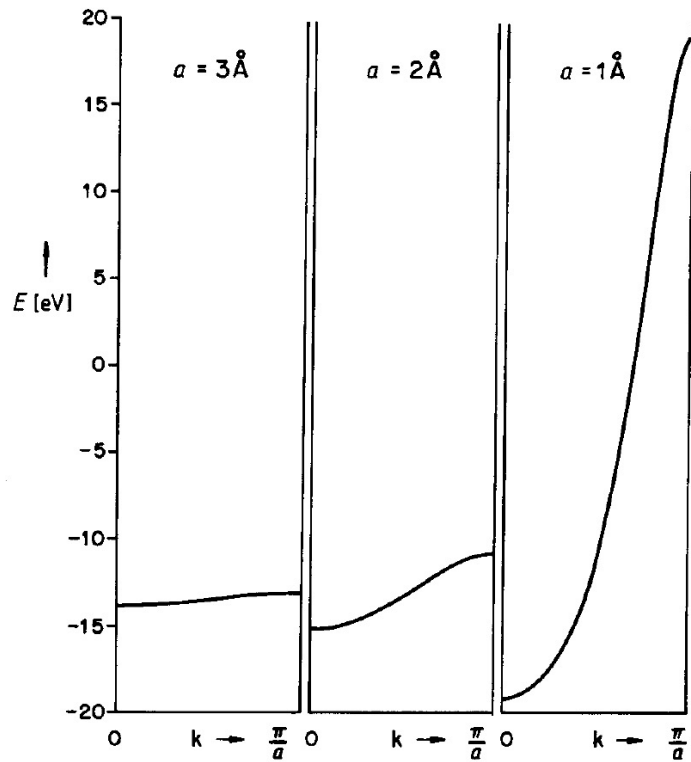
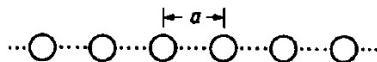
Diagram for $k=\frac{\pi}{a}$ showing alternating positive and negative phases (hatched and white circles).

ЗОННА СТРУКТУРА ЛАНЦЮЖКА АТОМІВ

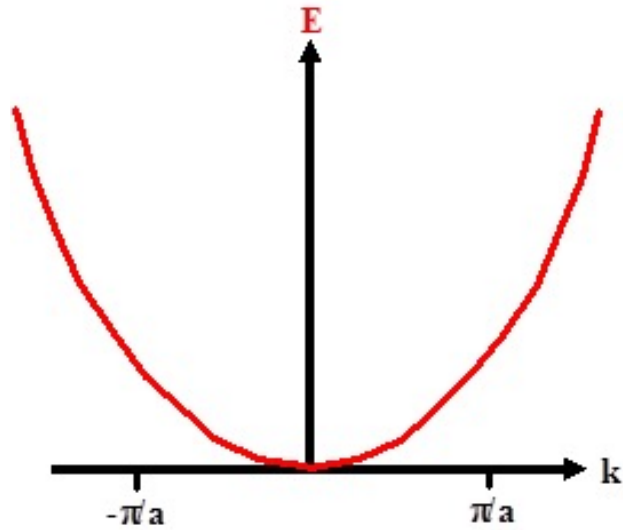
$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$



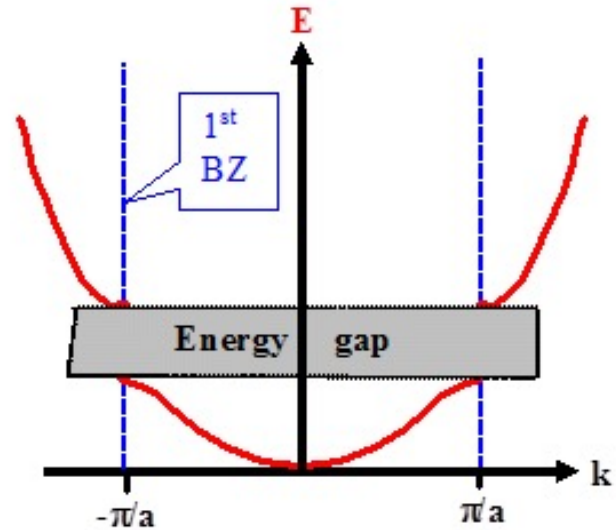
ЗОННА СТРУКТУРА ЛАНЦЮЖКА АТОМІВ



ЗОННА СТРУКТУРА ЛАНЦЮЖКА АТОМІВ

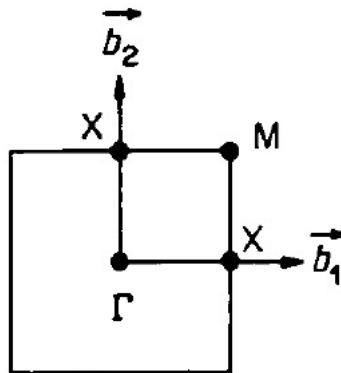
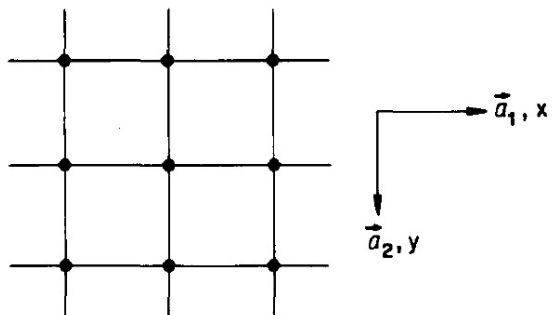


$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$



$$E(k_{\text{BZ}}) = \frac{(\hbar k_{\text{BZ}})^2}{2m} \pm \Delta E$$

ЗОННА СТРУКТУРА ПОВЕРХНІ

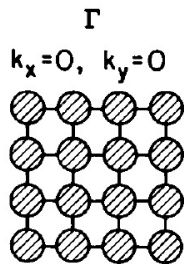
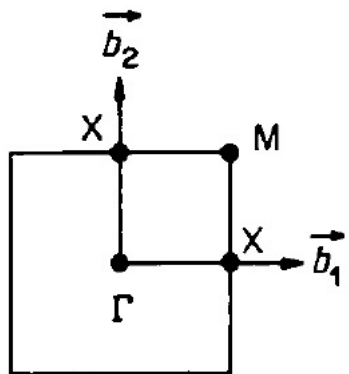


$$\Gamma = (0, 0)$$

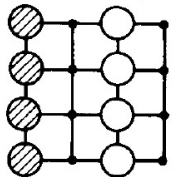
$$X = (\pi/a, 0) = (0, \pi/a)$$

$$M = (\pi/a, \pi/a)$$

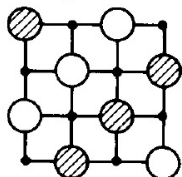
ЗОННА СТРУКТУРА ПОВЕРХНІ



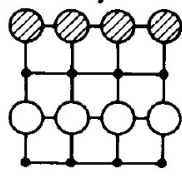
$k_x = \pi/(2a), k_y = 0$



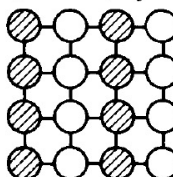
$k_x, k_y = \pi/(2a)$



$k_x = 0, k_y = \pi/(2a)$

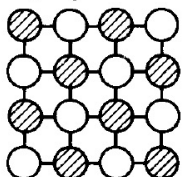


$k_x = \pi/a, k_y = 0$



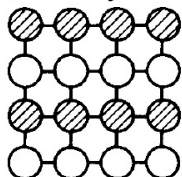
X

$k_x, k_y = \pi/a$

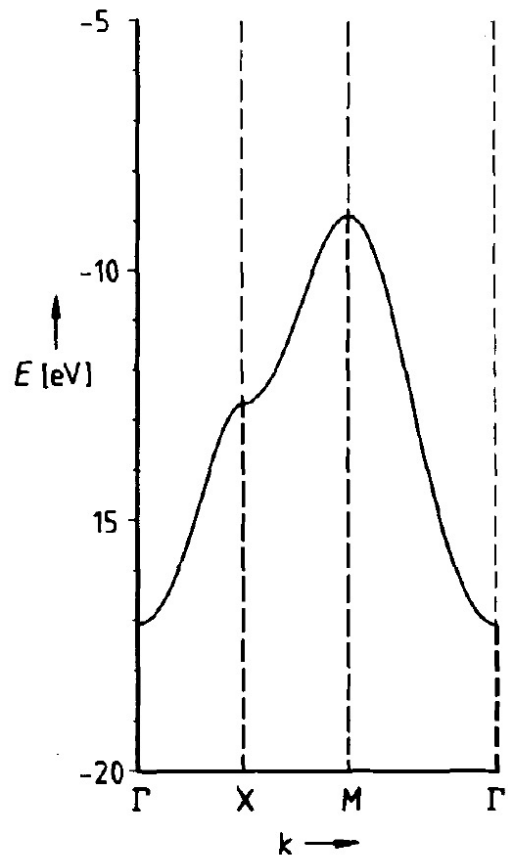


M

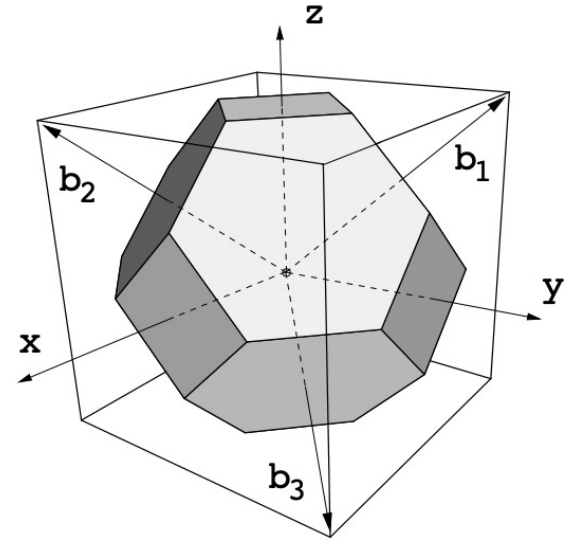
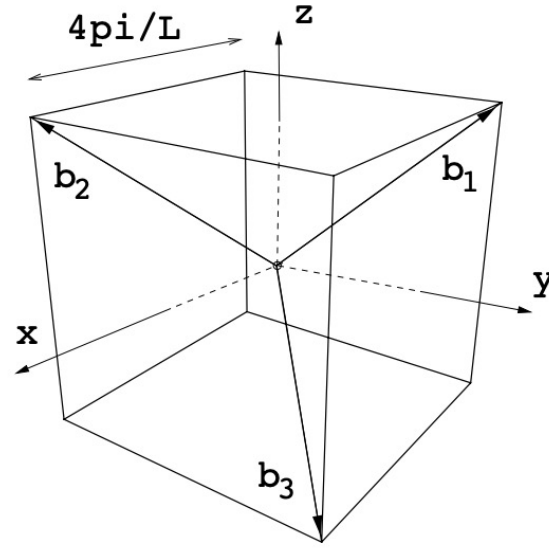
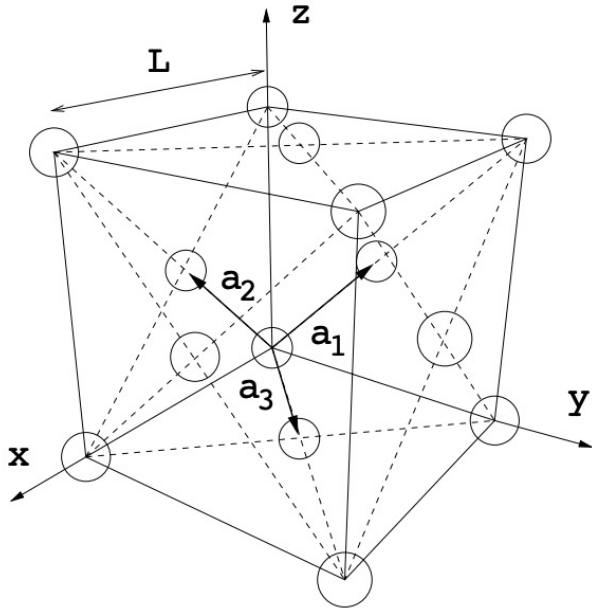
$k_x = 0, k_y = \pi/a$



X



ЗОНА БРІЛЛЮЕНА КРИСТАЛУ



$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$$

$$\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ

1. Самоузгоджений розрахунок
`pw.x < si.scf.in > si.scf.out`
2. Несамозгоджений розрахунок
`pw.x < si.nscf.in > si.nscf.out`
3. Розрахунок зон вздовж високосиметричних точок зони Бриллюена
`pw.x < si.band.in > si.band.out`
4. Постпроцесінг – виділення енергій із `si.band.out` в окремі файли
`band.x < si.band2.in > si.band2.out`
5. Постпроцесінг – побудова графіків
`plotband.x < si.band3.in > si.band3.out`

1. Самоузгоджений розрахунок

```
&control
  calculation = 'scf'
  prefix='silicon',
  pseudo_dir = './',
  wf_collect=.true.
/
&system
  ibrav= 2,
  celldm(1) =10.20,
  nat= 2,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =60.0,
  nbnd = 8
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
Si 28.086 Si.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS alat
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
K_POINTS {automatic}
8 8 8 0 0 0
```



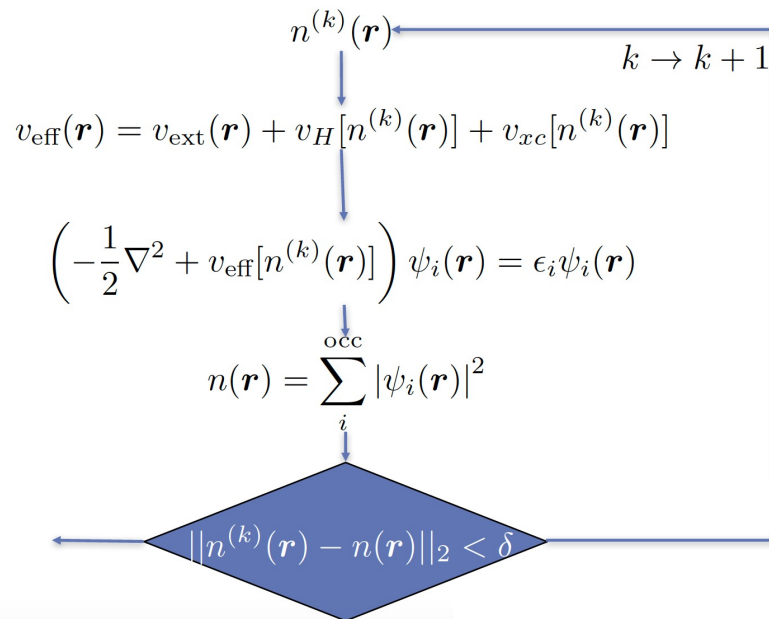
Кількість зон. Для напівпровідника вдвічі менше за кількість електронів, для металів – трохи більше за половину. Але в даному випадку вона дорівнює кількості електронів, інакше ми отримаємо лише заповнені валентні зони, і не отримаємо зону провідності.

2. Несамоузгоджений розрахунок

```
&control
  calculation = 'nscf'
  prefix='silicon',
  pseudo_dir = './',
  wf_collect=.true.
/
&system
  ibrav= 2,
  celldm(1) =10.20,
  nat= 2,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =60.0,
  nbnd = 8
  occupations = 'tetrahedra'
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
Si 28.086 Si.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS alat
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
K_POINTS {automatic}
12 12 12 0 0 0
```

2. Несамоузгоджений розрахунок

```
&control
  calculation = 'nscf'
  prefix='silicon',
  pseudo_dir = './',
  wf_collect=.true.
/
&system
  ibrav= 2,
  celldm(1) =10.20,
  nat= 2,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =60.0,
  nbnd = 8
  occupations = 'tetrahedra'
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
Si 28.086 Si.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS alat
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
K_POINTS {automatic}
12 12 12 0 0 0
```



2. Несамоузгоджений розрахунок

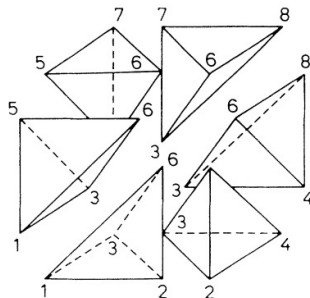
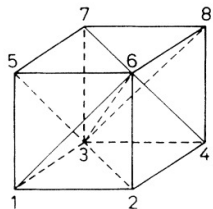
```
&control
  calculation = 'nscf'
  prefix='silicon',
  pseudo_dir = './',
  wf_collect=.true.
/
&system
  ibrav= 2,
  celldm(1) =10.20,
  nat= 2,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =60.0,
  nbnd = 8
  occupations = 'tetrahedra'
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
Si 28.086 Si.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS alat
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
K_POINTS {automatic}
12 12 12 0 0 0
```

Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations

[PE Blöchl](#), [O Jepsen](#), [OK Andersen](#) - *Physical Review B*, 1994 - APS

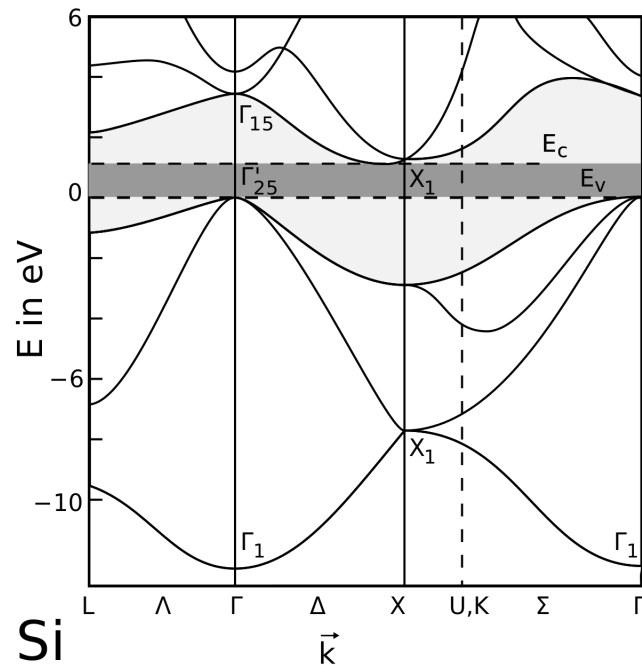
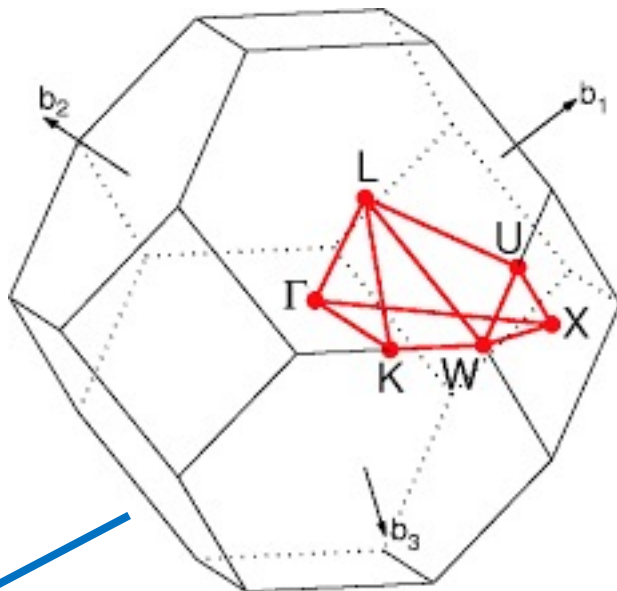
Several improvements of the tetrahedron method for Brillouin-zone integrations are presented.(1) A translational grid of k points and tetrahedra is suggested that renders the results for insulators identical to those obtained with special-point methods with the same number of k points.(2) A simple correction formula goes beyond the linear approximation of matrix elements within the tetrahedra and also improves the results for metals significantly. For a required accuracy this reduces the number of k points by orders of magnitude.(3) ...

☆ Зберегти [📄 Послатися](#) [Цитовано в 6424 джерелах](#) [Пов'язані статті](#) [Кількість версій: 5](#)



3. Розрахунок вздовж високосиметричного шляху

```
&control
  calculation = 'bands'
  prefix='silicon',
  pseudo_dir = './',
  wf_collect=.true.
/
&system
 ibrav= 2,
  celldm(1)=10.20,
  nat= 2,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =60.0,
  nbnd = 8
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
Si 28.086 Si.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS alat
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
K_POINTS {crystal_b}
5
0.5 0.5 0.5 20 !L
0.0 0.0 0.0 20 !Gamma
0.5 0.0 0.5 20 !X
0.625 0.25 0.625 20 !U
0.0 0.0 0.0 20 !Gamma
```



https://www.cryst.ehu.es/cryst/get_kvec.html

<https://www.materialscloud.org/work/tools/seekpath>

4. Постпроцесінг

Файл `si.band2.in`

```
&bands  
  prefix='silicon',  
  outdir = './',  
  filband = 'si.band.dat'  
/
```

Файл `si.band3.in`

```
si.band.dat  
-7 16 ← Интервал розрахунку в eV  
si.band.xmgr  
Si.band.ps  
6.6255 ← Енергія Фермі в eV (можна знайти в si.nscf.out)  
2.0 6.6255
```


4. Постпроцесінг, приклад скрипту в gnuplot

```
set ylabel 'Energy (eV)'
```

```
set ytics 5
```

```
unset key
```

```
x1 = 0.8660
```

```
x2 = 1.8660
```

```
x3 = 2.2196
```

```
xmax = 3.2802
```

```
ymin = -10
```

```
ymax = 10
```

```
ef = 6.6255
```

```
set xrange [0:xmax]
```

```
set yrange [ymin:ymax]
```

```
set xtics ("L" 0, "{/Symbol G}" x1, "X" x2, "K,U" x3, "{/Symbol G}" xmax)
```

```
set arrow 1 nohead from x1,ymin to x1,ymax lt 2
```

```
set arrow 2 nohead from x2,ymin to x2,ymax lt 2
```

```
set arrow 3 nohead from x3,ymin to x3,ymax lt 2
```

```
plot './si.band.dat.gnu' using 1:($2-ef) w l
```

Координати високосиметричних точок, можна знайти в si.band2.out

```
G-vector sticks info
```

```
-----
```

sticks:	dense	smooth	PW	G-vecs:	dense	smooth	PW
Sum	871	871	253		17153	17153	2733

```
Reading collected, re-writing distributed wavefunctions
```

```
high-symmetry point: -0.5000 0.5000 0.5000 x coordinate 0.0000
```

```
high-symmetry point: 0.0000 0.0000 0.0000 x coordinate 0.8660
```

```
high-symmetry point: -1.0000 0.0000 0.0000 x coordinate 1.8660
```

```
high-symmetry point: -1.0000 0.2500 0.2500 x coordinate 2.2196
```

```
high-symmetry point: 0.0000 0.0000 0.0000 x coordinate 3.2802
```

```
Plottable bands (eV) written to file si.band.dat.gnu
```

```
Bands written to file si.band.dat
```

Запис назв високосиметричних точок і потім побудова ліній, що їх відділяють

Запускати через gnuplot –persist plot.gp TAB
(після вводу команди нажати кнопку табуляції)