

# Комп'ютерне моделювання електронних властивостей матеріалів



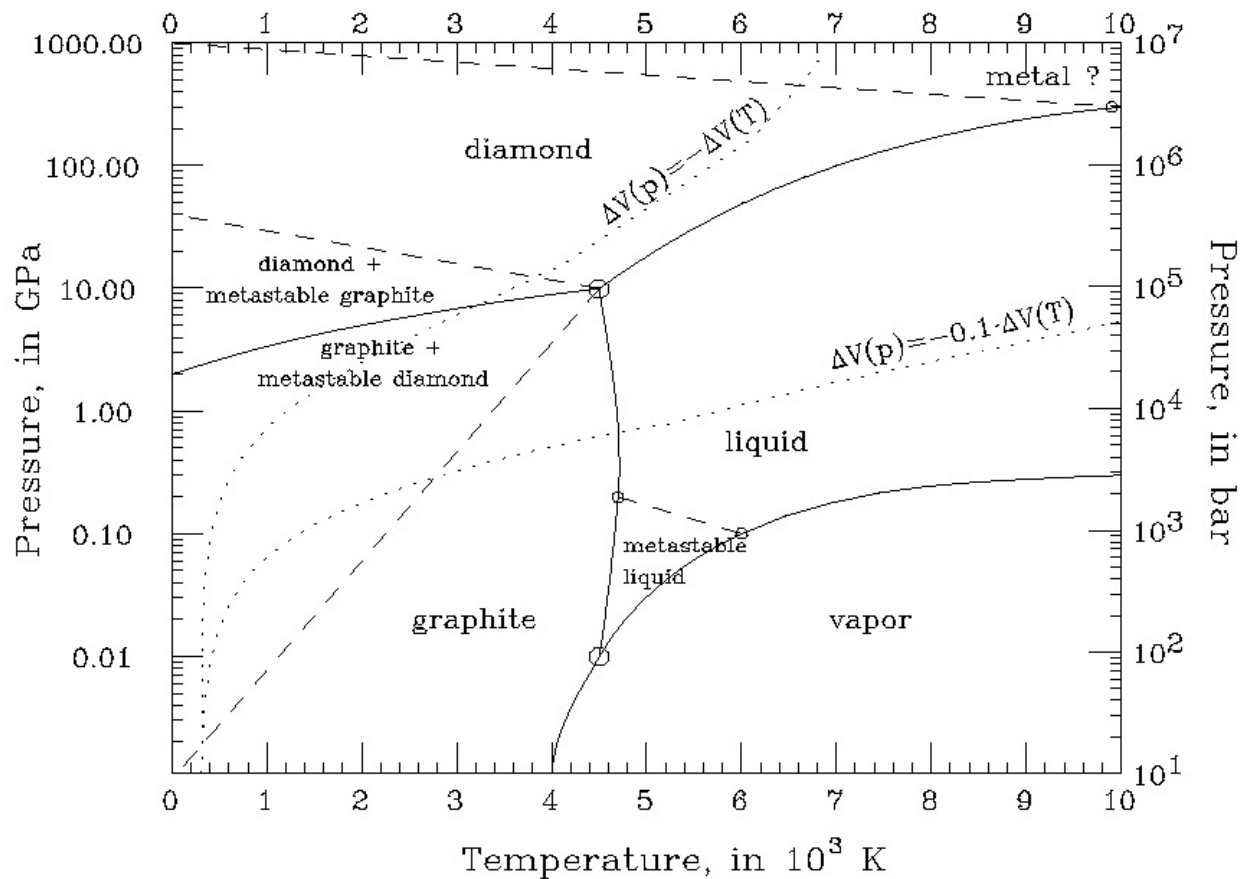
## Лабораторна робота 3 Релаксація кристалічної структури

Олег Фея, к.ф-м.н

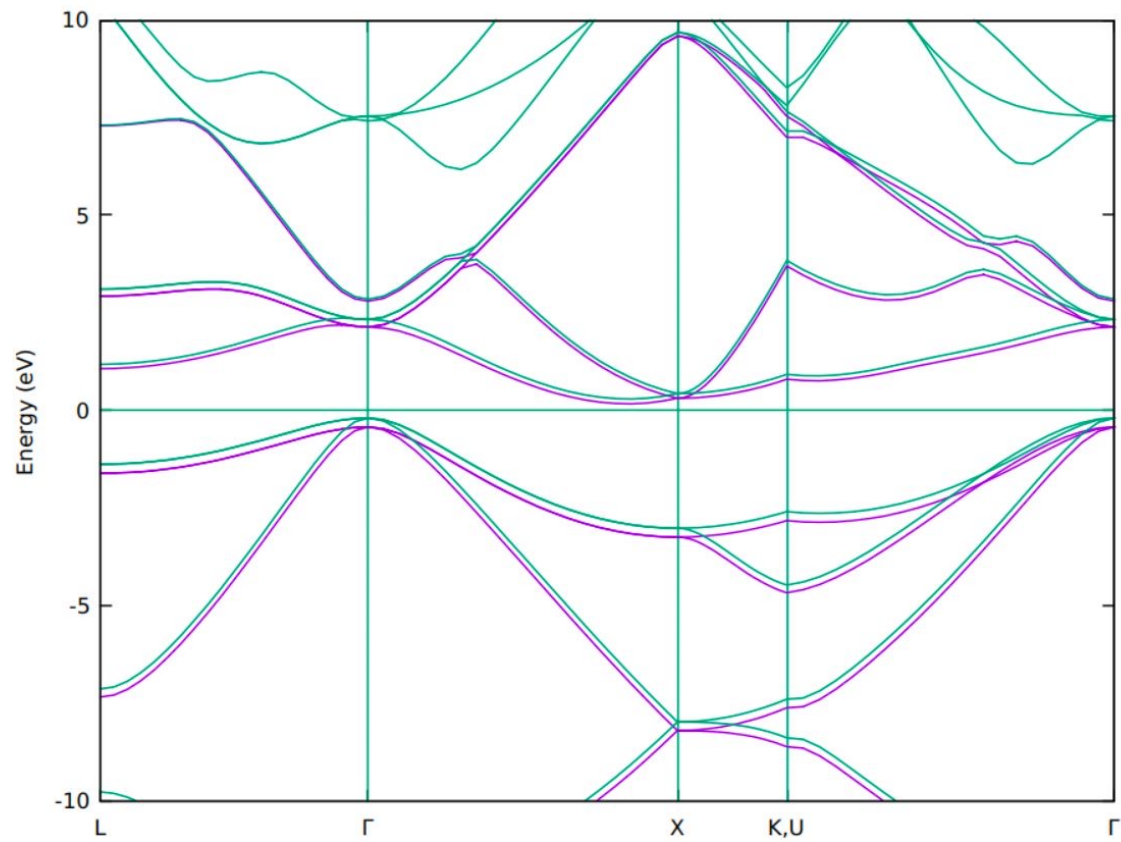
# Розбір ДЗ

Відмінність в енергії на один атом :

Відмінність в енергії на один атом :		
	Diamond	Graphite
total energy	-35,64	-71,27027432
on atom energy	-17,82	-17,81756858
difference energy	0,00266182	



# Розбір ДЗ



# АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ

1. Релаксація  
pw.x < c.vcrelax.in > c.vcrelax.out
2. Самоузгоджений розрахунок  
pw.x < c.scf.in > c.scf.out
3. Розрахунок зон вздовж високосиметричних точок зони Бріллюена  
pw.x < c.band.in > c.band.out
4. Постпроцесінг – виділення енергій із si.band.out в окремі файли  
band.x < c.band2.in > c.band2.out
5. Постпроцесінг – побудова графіків (опціонально)  
plotband.x < c.band3.in > c.band3.out

# 1. Релаксація

&control

**calculation = 'vc-relax'**

prefix='graphite',

pseudo\_dir = './',

**tprnfor= .true.,**

**tstress= .true.,**

**etot\_conv\_thr = 1.0d-8**

**forc\_conv\_thr = 1.0d-6**

/

&system

ibrav= 4,

celldm(1) = 4.650

celldm(3) = 3.51,

nat= 4,

ntyp= 1,

ecutwfc =50.0,

**occupations = 'smearing'**

**smearing = 'gaussian'**

**degauss = 0.02**

/

&electrons

mixing\_mode = 'plain'

mixing\_beta = 0.7

conv\_thr = 1.0d-8

/

← Опція релаксації структури.

relax – зміна положень лише атомів,

vc-relax – зміна положень атомів і геометричних розмірів комірки

← Опції, що дозволяють рахувати сили та тиск

← Точність розрахунку енергії та сил

← Тип інтеграції зони Бріллюена

# 1. Релаксація

&ions

```
ion_dynamics = 'bfgs'
```

Блок, що відповідає за зміну положень атомів

```
/
```

&cell

```
cell_dynamics = 'bfgs',
```

```
cell_dofree = 'ibrav',
```

```
press = 0.0
```

```
press_conv_thr = 0.0
```

```
/
```

ATOMIC\_SPECIES

```
C 12.011 C.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
```

ATOMIC\_POSITIONS crystal

```
C 0.00 0.00 1/4
```

```
C 0.00 0.00 3/4
```

```
C 1/3 2/3 1/4
```

```
C 2/3 1/3 3/4
```

K\_POINTS {automatic}

```
8 8 4 0 0 0
```

Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno



# 1. Релаксація

&ions

```
ion_dynamics = 'bfgs'
```

← Блок, що відповідає за зміну положень атомів

```
/
```

&cell

```
cell_dynamics = 'bfgs',
```

```
cell_dofree = 'ibrav',
```

```
press = 0.0
```

```
press_conv_thr = 0.0
```

```
/
```

ATOMIC\_SPECIES

C 12.011 C.pz-n-kjpaw\_psl.0.1.UPF

ATOMIC\_POSITIONS crystal

C 0.00 0.00 1/4

C 0.00 0.00 3/4

C 1/3 2/3 1/4

C 2/3 1/3 3/4

K\_POINTS {automatic}

8 8 4 0 0 0

$$f(x_{n+1}) < f(x_n).$$

$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + \Delta x^T \nabla f(x) + \frac{1}{2} \Delta x^T (\nabla^2 f(x)) \Delta x$$

$$h_n(\Delta x) = f(x_n) + \Delta x^T \mathbf{g}_n + \frac{1}{2} \Delta x^T \mathbf{H}_n \Delta x$$

$$\frac{\partial h_n(\Delta x)}{\partial \Delta x} = \mathbf{g}_n + \mathbf{H}_n \Delta x$$

$$\Delta x = -\mathbf{H}_n^{-1} \mathbf{g}_n$$

$$x_{n+1} = x_n - \alpha (\mathbf{H}_n^{-1} \mathbf{g}_n)$$

# 1. Релаксація

&ions

```
ion_dynamics = 'bfgs'
```

```
/
```

&cell

```
cell_dynamics = 'bfgs',
```

```
cell_dofree = 'ibrav',
```

```
press = 0.0
```

```
press_conv_thr = 0.0
```

```
/
```

```
ATOMIC_SPECIES
```

```
C 12.011 C.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
```

```
ATOMIC_POSITIONS crystal
```

```
C 0.00 0.00 1/4
```

```
C 0.00 0.00 3/4
```

```
C 1/3 2/3 1/4
```

```
C 2/3 1/3 3/4
```

```
K_POINTS {automatic}
```

```
8 8 4 0 0 0
```

← Блок, що відповідає за зміну положень атомів

**QuasiNewton**( $f, x_0, \mathbf{H}_0^{-1}, \text{QuasiUpdate}$ ) :

For  $n = 0, 1, \dots$  (until converged) :

// Compute search direction and step-size

$$d = \mathbf{H}_n^{-1} \mathbf{g}_n$$

$$\alpha \leftarrow \min_{\alpha \geq 0} f(x_n - \alpha d)$$

$$x_{n+1} \leftarrow x_n - \alpha d$$

// Store the input and gradient deltas

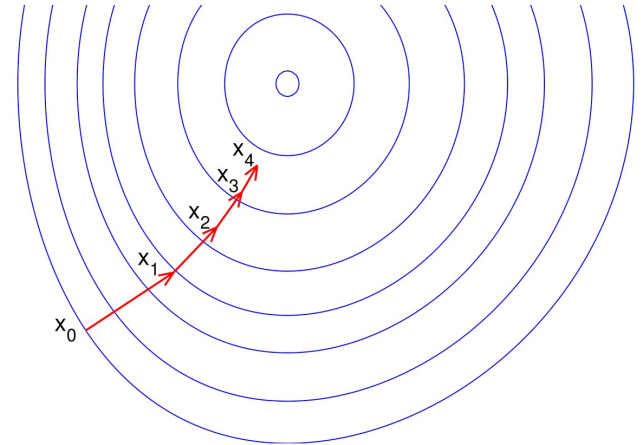
$$\mathbf{g}_{n+1} \leftarrow \nabla f(x_{n+1})$$

$$s_{n+1} \leftarrow x_{n+1} - x_n$$

$$y_{n+1} \leftarrow \mathbf{g}_{n+1} - \mathbf{g}_n$$

// Update inverse hessian

$$\mathbf{H}_{n+1}^{-1} \leftarrow \text{QuasiUpdate}(\mathbf{H}_n^{-1}, s_{n+1}, y_{n+1})$$





# 1. Релаксація

**&ions**

```
ion_dynamics = 'bfgs'
```



Блок, що відповідає за зміну положень атомів

```
/
```

**&cell**

```
cell_dynamics = 'bfgs',
```

```
cell_dofree = 'ibrav',
```



Блок, що відповідає за зміну геометрії комірки

```
press = 0.0
```

```
press_conv_thr = 0.0
```

```
/
```

ATOMIC\_SPECIES

```
C 12.011 C.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
```

ATOMIC\_POSITIONS crystal

```
C 0.00 0.00 1/4
```

```
C 0.00 0.00 3/4
```

```
C 1/3 2/3 1/4
```

```
C 2/3 1/3 3/4
```

K\_POINTS {automatic}

```
8 8 4 0 0 0
```

## 2. Самоузгоджений розрахунок

```
&control
  calculation = 'scf'
  prefix='graphite',
  pseudo_dir = './'
/
&system
  ibrav= 4,
  celldm(1) = 4.62246457, ← Беруться із попереднього розрахунку, з файлу c.vcrelax.out
  celldm(3) = 2.69136729,
  nat= 4,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =50.0,
  occupations = 'smearing'
  smearing = 'gaussian'
  degauss = 0.02,
  nbnd = 16 ← Кількість зон. 4 атоми в комірці по 4 валентних електрони кожен
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
C 12.011 C.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS crystal
C 0.00 0.00 0.25
C 0.00 0.00 0.75
C 0.333333 0.666667 0.25
C 0.666667 0.333333 0.75
K_POINTS {automatic}
9 9 3 0 0 0
```

# 3. Розрахунок вздовж високосиметричного шляху

```
&control
  calculation = 'bands'
  prefix='graphite',
  pseudo_dir = './'
/
&system
 ibrav= 4,
celldm(1) = 4.62246457,
celldm(3) = 2.69136729,
nat= 4,
ntyp= 1,
ecutwfc =50.0,
occupations = 'smearing'
smearing = 'gaussian'
degauss = 0.02,
nbnd = 16
/
&electrons
  mixing_mode = 'plain'
  mixing_beta = 0.7
  conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
C 12.011 C.pz-n-kjpaw_psl.0.1.UPF
ATOMIC_POSITIONS crystal
C 0.00 0.00 0.25
C 0.00 0.00 0.75
C 0.333333 0.666667 0.25
C 0.666667 0.333333 0.75
```

## 4. Постпроцесінг

### Файл c.band2.in

```
&bands  
  prefix='graphite',  
  outdir = './',  
  filband = 'c.band.dat'  
/
```

### Файл c.band3.in

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