

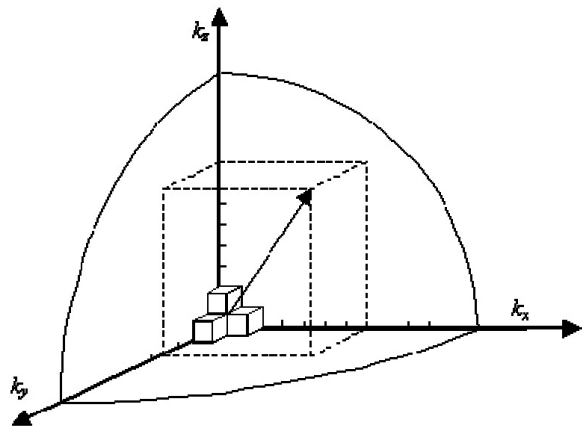
Комп'ютерне моделювання електронних властивостей матеріалів



Лабораторна робота 5 Густина електронних станів

Олег Фея, к.ф-м.н

Густина електронних станів (DOS – Density of states)



$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ об'єм оберненого простору, що приходить на одну комірку з урахуванням спінів вгору і вниз

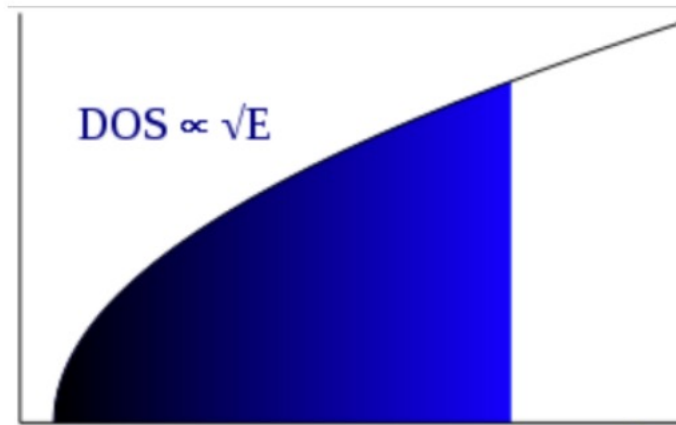
$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad \frac{4}{3}\pi k^3$$

$$N^{3D} = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \cdot 2 = L^3 \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{3}{2}}$$

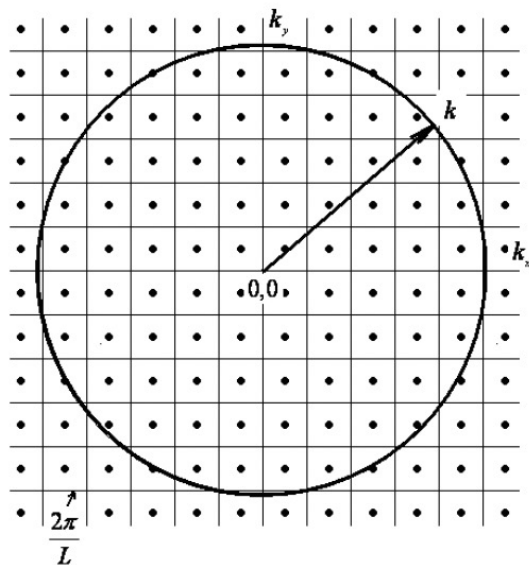
кількість станів з урахуванням спіна

$$g^{3D}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

густина станів



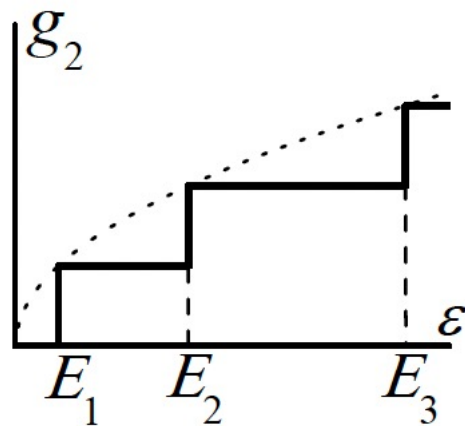
Густина електронних станів в 2D



$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \pi k^2 \quad k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$$

$$N^{2D} = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \cdot 2 = L^2 \frac{m}{\pi \hbar^2} \varepsilon$$

$$g^{2D}(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$$



Густина електронних станів в 1D, 2D та 3D

$$\frac{2\pi}{L} k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad 2k$$

$$N^{1D} = \frac{2k}{\frac{2\pi}{L}} \cdot 2 = L \frac{2}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

$$g^{1D}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \varepsilon^{-\frac{1}{2}}$$

$$\left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad \pi k^2$$

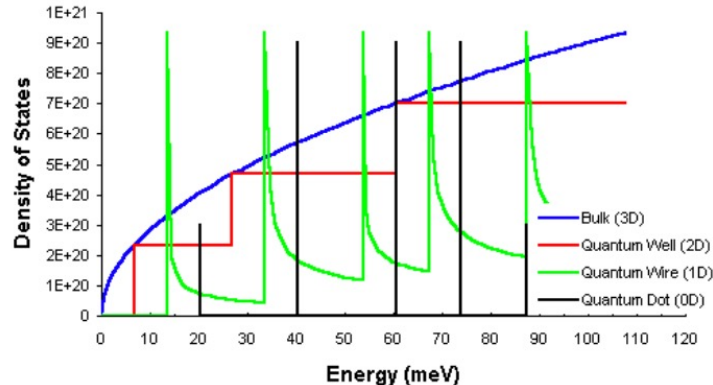
$$N^{2D} = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^2} \cdot 2 = L^2 \frac{m}{\pi\hbar^2} \varepsilon$$

$$g^{2D}(\varepsilon) = \frac{m}{\pi\hbar^2}$$

$$\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 \frac{4}{3} \pi k^3$$

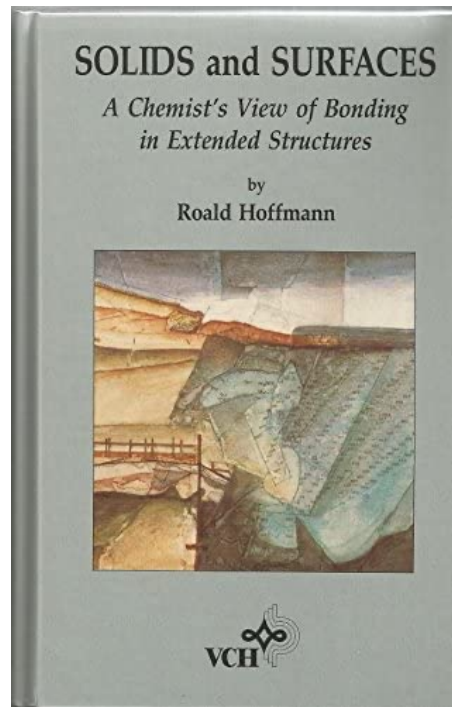
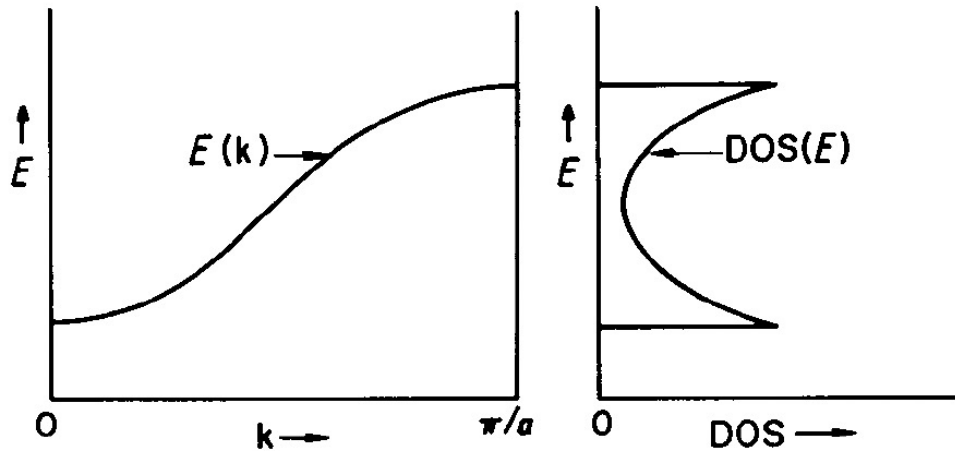
$$N^{3D} = \frac{\frac{4}{3} \pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3} \cdot 2 = L^3 \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{3}{2}}$$

$$g^{3D}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

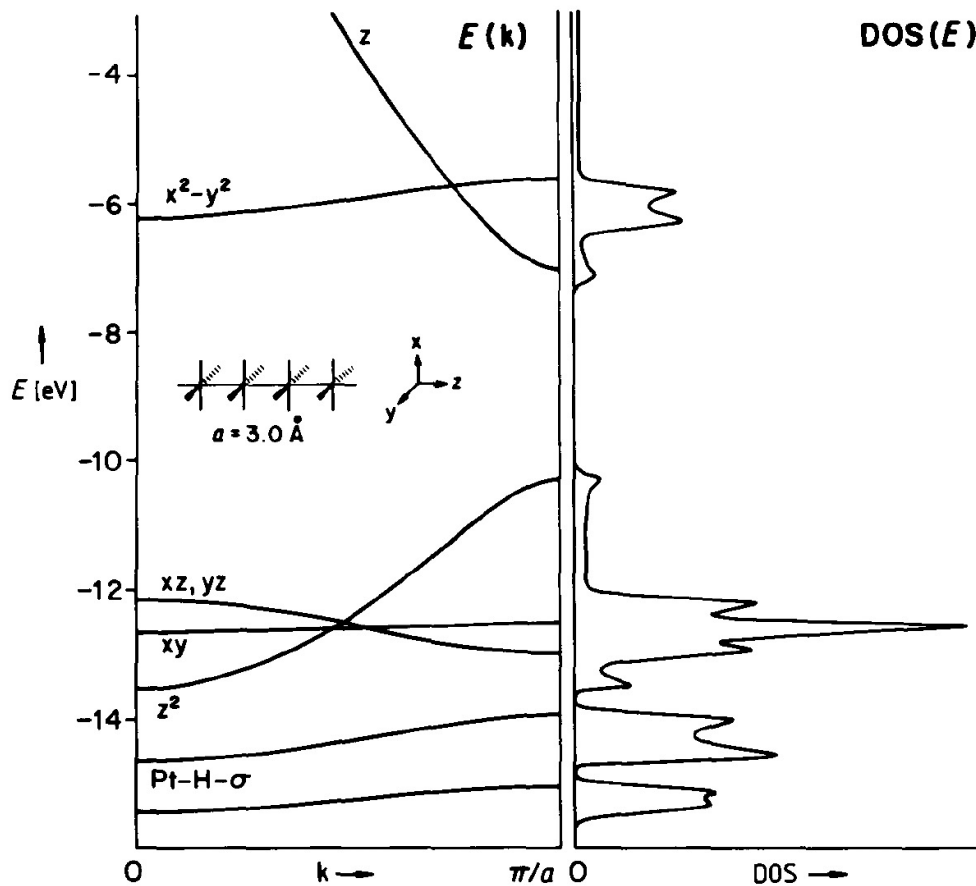


Густина станів та зонна структура

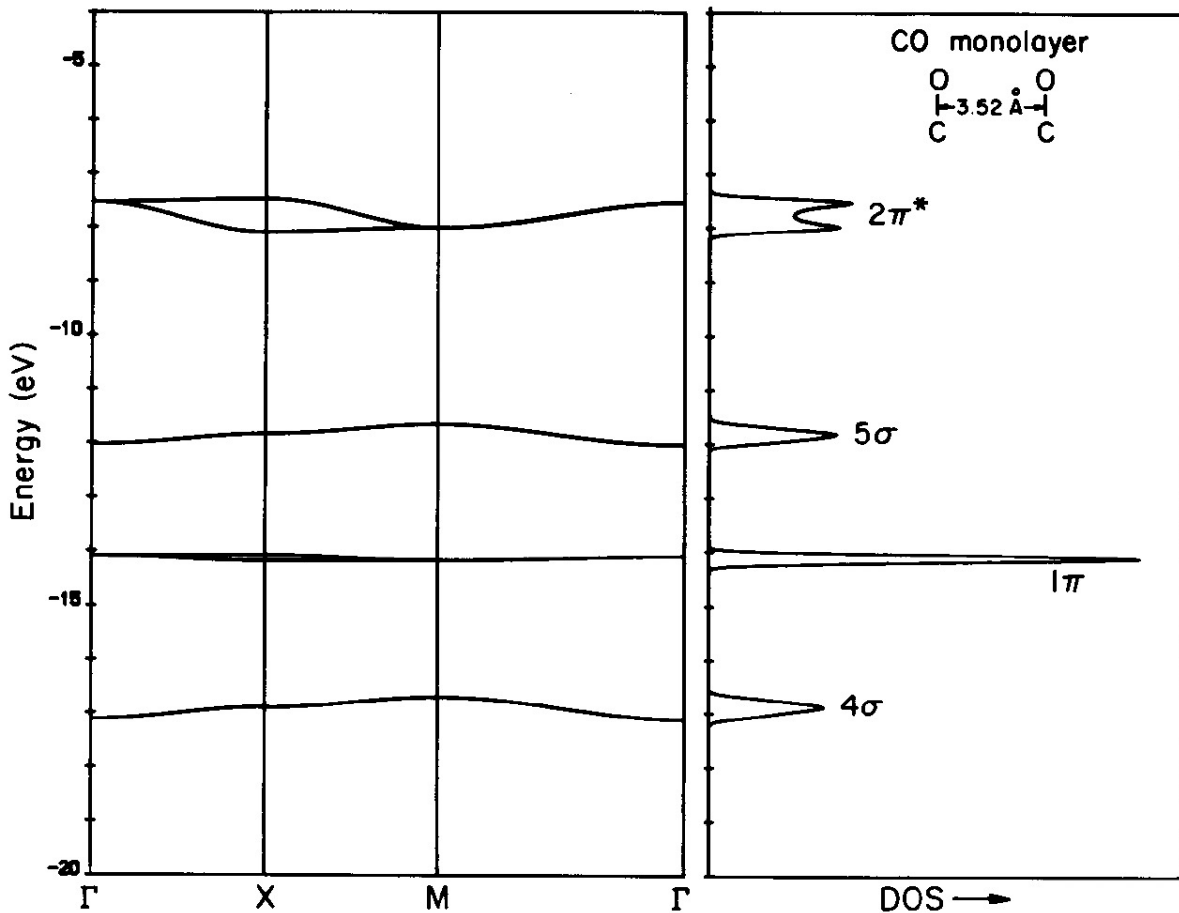
$\text{DOS}(E)dE$ – кількість станів в інтервалі енергій E та $E+dE$



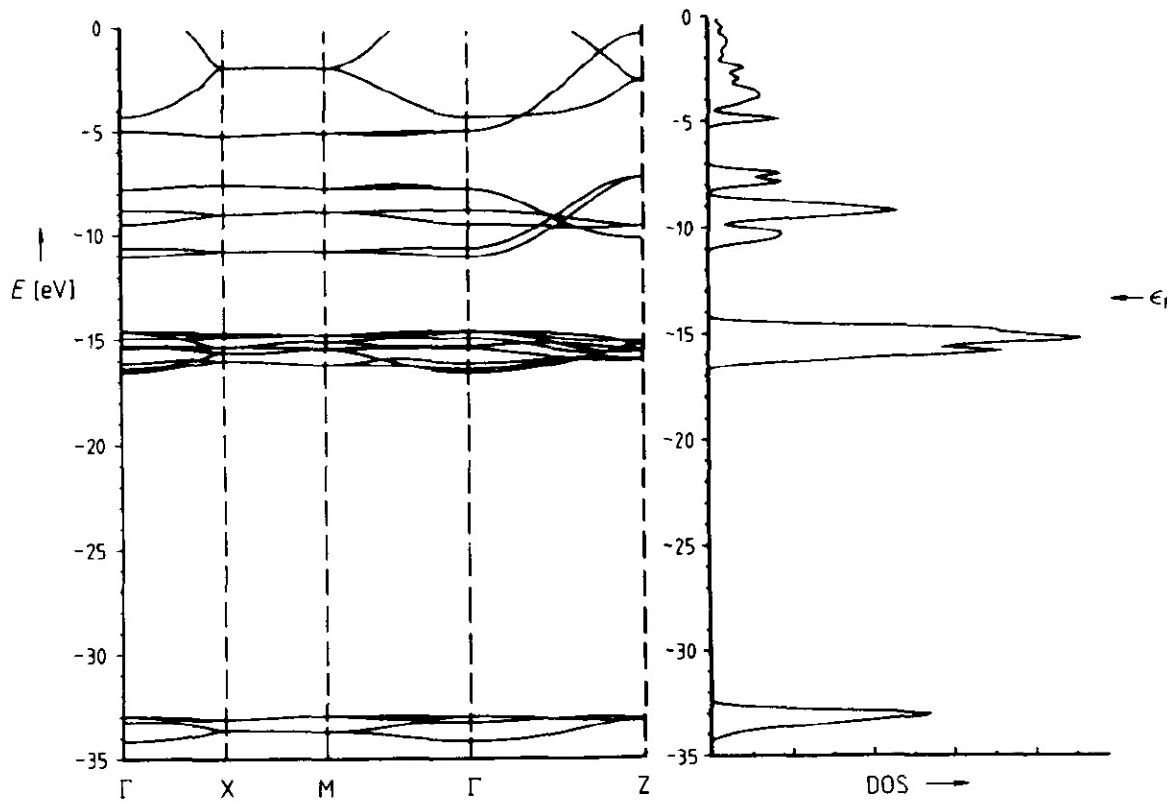
Густина станів та зонна структура (PtH_4)



Густина станів та зонна структура (CO)



Густина станів та зонна структура (TiO₂)



АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ

1. Релаксація
pw.x < c.vcrelax.in > c.vcrelax.out

2. Самоузгоджений розрахунок
pw.x < c.scf.in > c.scf.out



Розрахунок зонної структури

3. Розрахунок зон вздовж високосиметричних точок зони Бріллюена
pw.x < c.band.in > c.band.out

Розрахунок густини станів

3. Несамоузгоджений розрахунок
pw.x < c.nscf.in > c.nscf.out

4. Постпроцесінг – виділення енергій із c.band.out в окремі файли
bands.x < c.band2.in > c.band2.out

4. Постпроцесінг – виділення електронних станів
dos.x < c.dos.in > c.dos.out



5. Побудова єдиного графіку
gnuplot -persist plot_dos+bands.gp

1. Релаксація

&control (графіт)

```
calculation = 'vc-relax'  
prefix='graphite',  
pseudo_dir = './',  
tprnfor= .true.,  
tstress= .true.,  
etot_conv_thr = 1.0d-6  
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
```

/

&ions (графіт)

```
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 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}

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

2. Самоузгоджений розрахунок

```
&control
  calculation = 'scf'
  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
K_POINTS {automatic}
9 9 3 0 0 0
```

3. Несамоузгоджений розрахунок (густина станів)

```
&control
  calculation = 'nscf'
  prefix='graphite',
  pseudo_dir = './'
/
&system
  ibrav= 4,
  celldm(1) = 4.62246457,
  celldm(3) = 2.69136729,
  nat= 4,
  ntyp= 1,
  ecutwfc =50.0,
occupations = 'tetrahedra_opt'
  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
K_POINTS {automatic}
16 16 8 0 0 0
```

4. Виділення електронних станів

&dos

prefix='graphite',

outdir = './',

fildos = 'c.dos.dat',

DeltaE = 0.01

/