

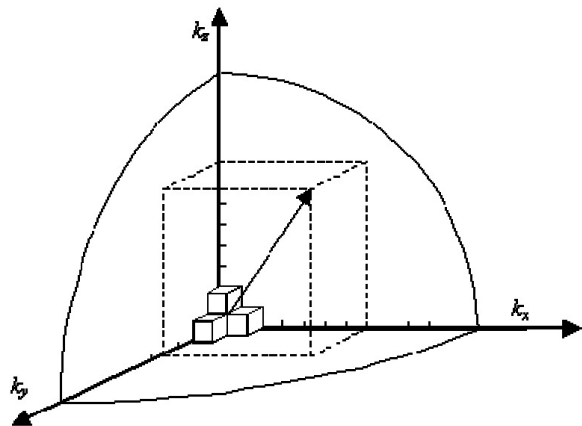
Комп'ютерне моделювання електронних властивостей матеріалів



Лабораторна робота 6 Парціальна густина 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

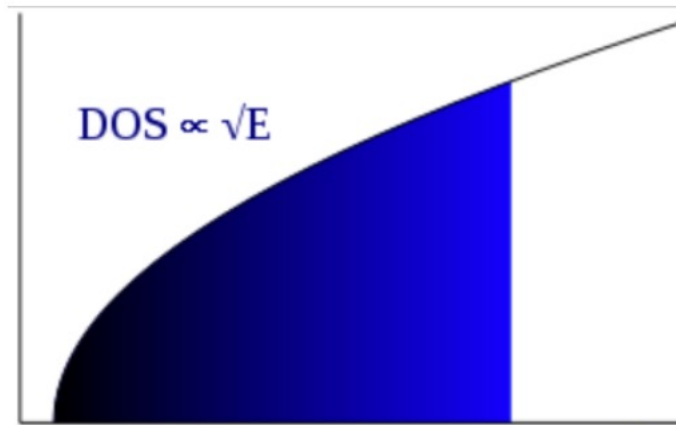
$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad \frac{4}{3}\pi k^3$$

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

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 1D, 2D та 3D

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

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

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

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

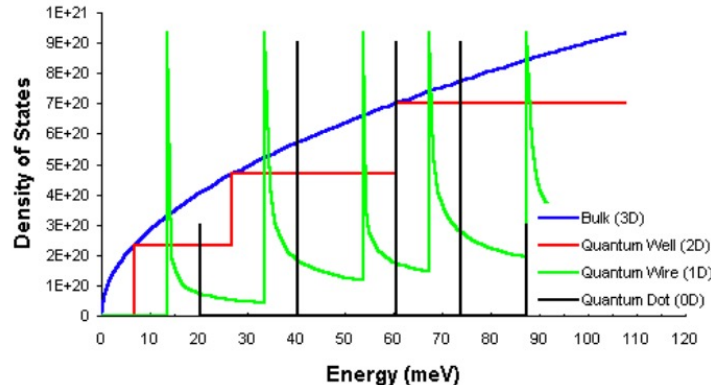
$$N^{2D} = \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^2} \cdot 2 = L^2 \frac{m}{\pi\hbar^2} \varepsilon$$

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

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

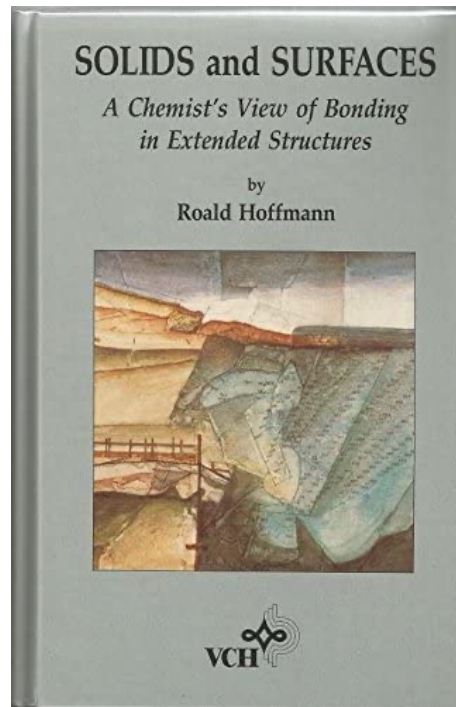
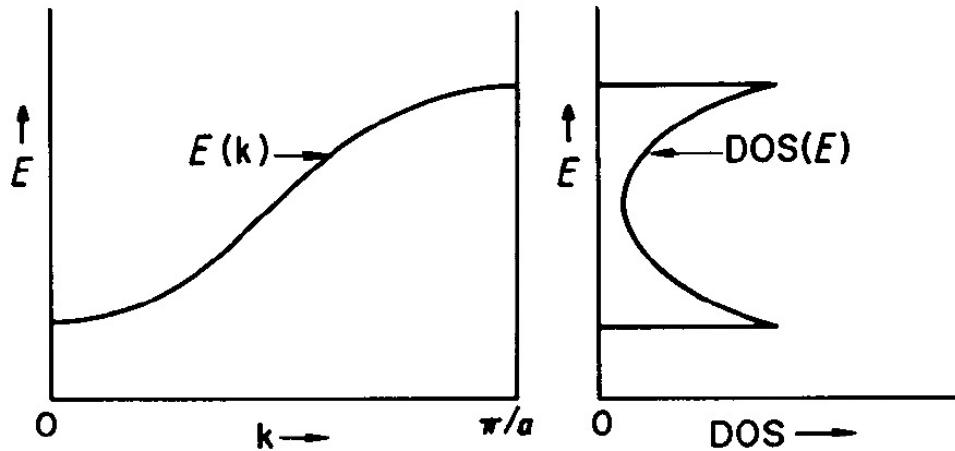
$$N^{3D} = \frac{\frac{4}{3} \pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3} \cdot 2 = L^3 \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{3}{2}}$$

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

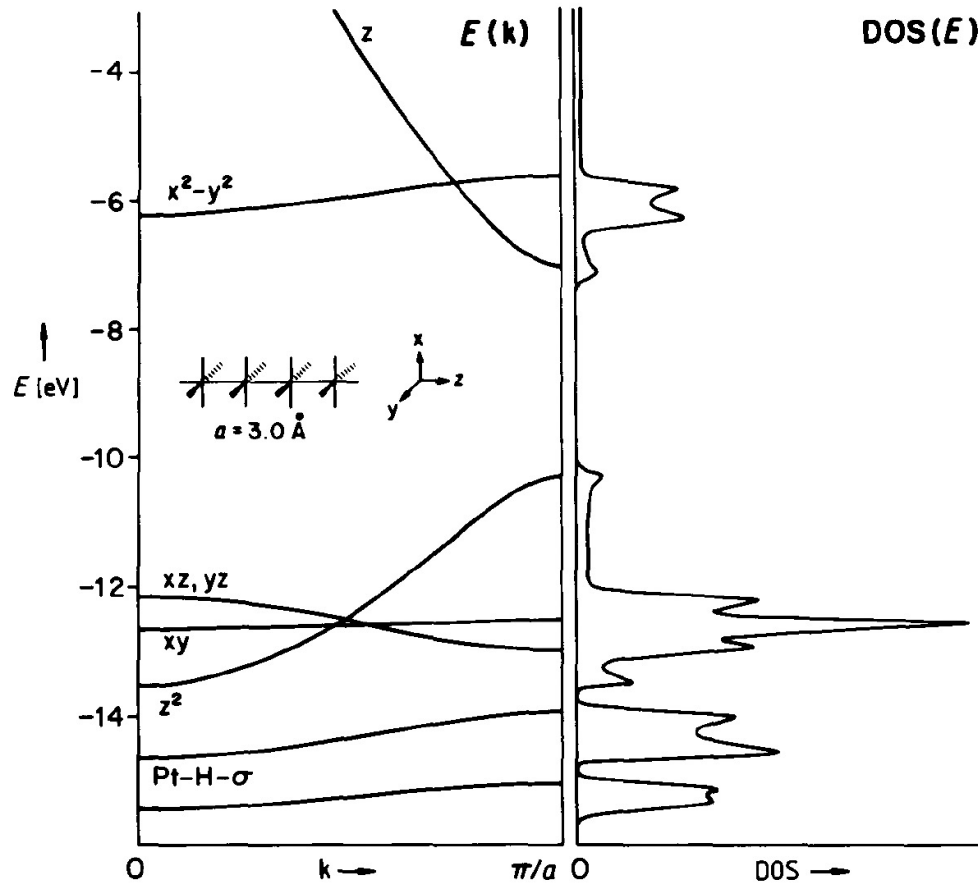


Густина станів та зонна структура

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



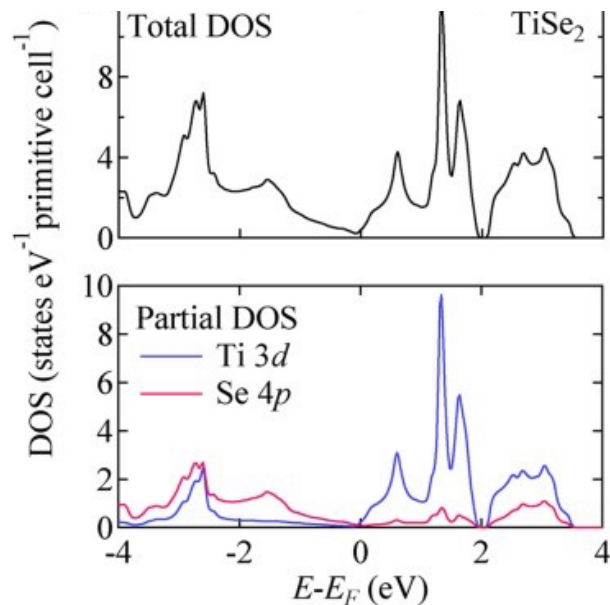
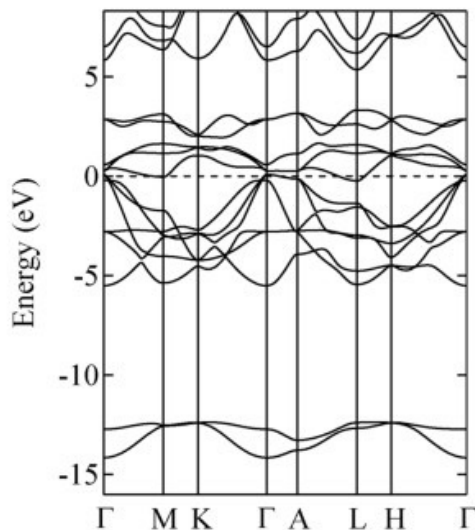
Густина станів та зонна структура (PtH_4)



Парціальна густина станів

$$d_n(E) = \sum_{\text{all } E_k} |\langle n | \Psi_k \rangle|^2 \delta(E - E_k) \text{ - парціальна густина станів, 1D}$$

$$D(E) = \sum_{\text{all } n} d_n(E) = \sum_{\text{all } E_k} \delta(E - E_k) \text{ - загальна густина станів, 1D}$$



АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ

1. Релаксація
pw.x < c.vcrelax.in > c.vcrelax.out
2. Самоузгоджений розрахунок
pw.x < c.scf.in > c.scf.out
3. Несамоузгоджений розрахунок
pw.x < c.nscf.in > c.nscf.out



4. Постпроцесінг – виділення парціальних станів
projwfc.x < c.pdos.in > c.pdos.out



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

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

Загальна густина станів

```
&dos
  prefix='graphite',
  outdir = './',
  fildos = 'c.dos.dat',
  DeltaE = 0.01
/
```

Парціальна густина станів

```
&projwfc
  prefix='graphite',
  outdir = './',
  filpdos = 'c.pdos.dat',
  DeltaE = 0.01
/
```



Отримуємо набір файлів, що відповідають орбітям кожного атому

c.pdos.dat.pdos_atm#1(C)_wfc#1(s) - стани для s-орбіталі атома 1 з файлу c.scf.in

c.pdos.dat.pdos_atm#1(C)_wfc#2(p) - стани для p-орбіталей атома 1 з файлу c.scf.in

....

c.pdos.dat.pdos_tot – загальна густина

sumpdos.x *(C)* > C_total_dos.dat – зібрати докупи усі стани з файлів

sumpdos.x *(C)*\s > C_s.dat – зібрати стани для s-орбіталей

sumpdos.x *(C)*\p > C_p.dat - зібрати стани для p-орбіталей

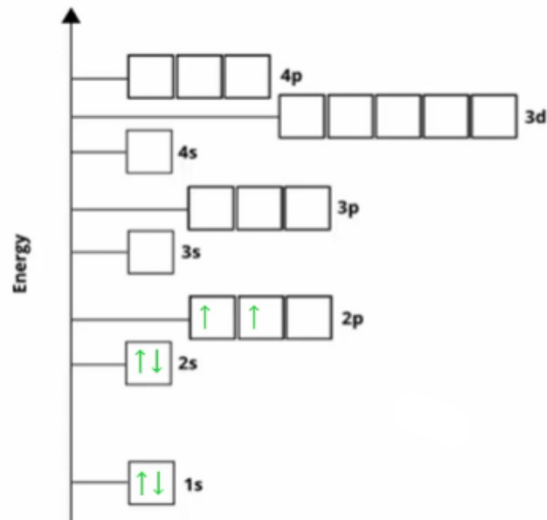
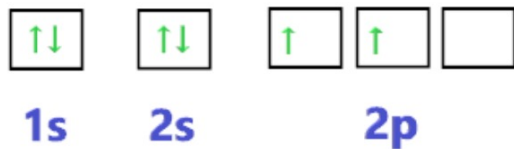
Парціальна густина станів в QE

E LDOS(E) PDOS₁(E) ... PDOS_{2l+1}(E)

$$LDOS = \sum_{m=1}^{2l+1} PDOS_m(E)$$

- for $l = 1$:
 - p_z ($m = 0$)
 - p_x (real combination of $m = \pm 1$ with cosine)
 - p_y (real combination of $m = \pm 1$ with sine)
- for $l = 2$:
 - d_{z^2} ($m = 0$)
 - d_{zx} (real combination of $m = \pm 1$ with cosine)
 - d_{zy} (real combination of $m = \pm 1$ with sine)
 - $d_{x^2-y^2}$ (real combination of $m = \pm 2$ with cosine)
 - d_{xy} (real combination of $m = \pm 2$ with sine)

Гібридизація орбіталей в графіті



Гібридизація орбіталей в графіті

