

# Metody ab initio w fizyce ciała stałego

## Laboratorium 2

Gabriel Kuderowicz

13 listopada 2025

### 1 Cel

- Wyznaczenie elektronowej relacji dyspersji, gęstości stanów i powierzchni Fermiego TiC.

### 2 TiC

TiC (węgiel tytanu) krystalizuje w strukturze regularnej powierzchniowo centrowanej typu NaCl. Korzystając z programu **makestruct\_lapw** proszę zdefiniować komórkę: typ sieci F, stała sieci 8.202312  $a_B$ , Ti w pozycji (0,0,0) a C w (0.5,0.5,0.5). Następnie proszę zainicjalizować obliczenia **init\_lapw**: domyślne RMT, potencjał wymienio-korelacyjny PBE, siatka **k** do SCF 12<sup>3</sup>. Obliczenia SCF **nohup run\_lapw &** powinny zająć ok. 2 min i na koniec proszę zapisać wyniki do folderu **save\_lapw -d scf**.

#### 2.1 Powierzchnia Fermiego

Powierzchnia Fermiego rozdziela zajęte stany poniżej energii Fermiego  $E_F$  od pustych powyżej  $E_F$ . Jest to słuszne w zerowej temperaturze, w której można zdefiniować taki wyraźny podział. W  $T > 0$  powierzchnia Fermiego i pasma stają się rozmyte. Ponieważ  $E_F$  jest znacznie większa od energii termicznej, nawet w temperaturze pokojowej, wiele własności jest określonych przez stany w pobliżu  $E_F$ . Powierzchnia Fermiego to tak naprawdę zbiór punktów  $E(\mathbf{k}) = E_F$  i można go wykorzystać w dalszych obliczeniach, na przykład przewodności elektrycznej.

Rysunek powierzchni Fermiego na przykład może pomóc zauważyć anizotropię. Obecność dużych równoległych płatów, czyli takich które można połączyć jednym wektorem, powoduje tak zwany nesting powierzchni Fermiego.

Po wykonaniu obliczeń SCF, można narysować powierzchnię Fermiego wywołując **xcrysden** w folderze z obliczeniami (kropka na końcu jest ważna, trzeba podać folder - w tym przypadku obecny katalog):

```
xcrysden --wien_fermisurface .
```

Proszę zadać 14000 punktów **k**, co odpowiada siatce 24<sup>3</sup>.

#### 2.2 Struktura pasmowa

Ponownie chcemy policzyć energie  $E(\mathbf{k})$ , ale tym razem wzdłuż konkretnej ścieżki punktów **k**. Rysunek struktury pasmowej pomaga zobrazować kształt krzywych  $E(\mathbf{k})$ , skąd można policzyć masę efektywną:

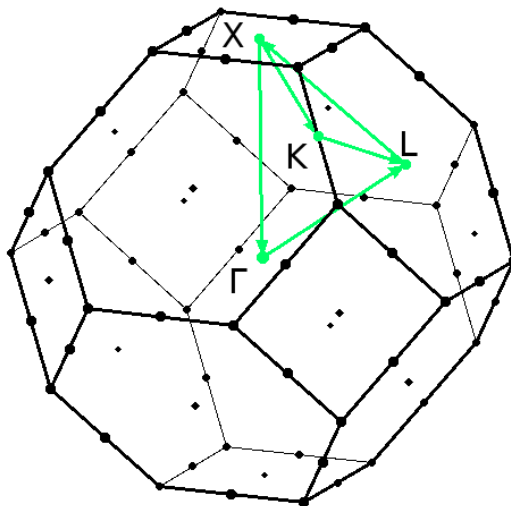
$$m^* \propto \frac{1}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}. \quad (1)$$

Zatem płaskie krzywe oznaczają dużą masę efektywną nośników. Jeżeli  $E_F$  wychodzi z obliczeń bardzo blisko krawędzi pasma walencyjnego lub przewodnictwa, a między nimi widać przerwę pasmową, to prawdopodobnie związek jest półprzewodnikiem (izolatory mają szeroką przerwę rzędu kilku eV). Stany związane z jądrami atomowymi leżą głęboko poniżej  $E_F$  (od kilku do kilku tysięcy Ry) i tworzą bardzo wąskie pasma, dlatego często nie trzeba ich uwzględniać w obliczeniach bezpośrednio.

Strukturę pasmową rysuje się na ścieżce pomiędzy kolejnymi wybranymi punktami  $\mathbf{k}$  i zadaje się ją w xcrysden wywołując (kropka na końcu jest ważna, trzeba podać folder - w tym przypadku obecny katalog):

```
xcrysden --wien_kpath .
```

Proszę zadać ścieżkę X- $\Gamma$ -L-X-K-L jak na rysunku poniżej i zapisać ją w pliku o nazwie takiej jak obecny folder z rozszerzeniem .klist\_band. Następnie należy policzyć energie na wybranej ścieżce:



```
x lapw1 -band
```

Niestety plik wejściowy do rysowania pasm nie jest tworzony podczas inicjalizacji, dlatego proszę skopiować szablon /home/magazyn/fcs\_przyklady/template.insp i wstawić w nim  $E_F$ , którą można znaleźć w pliku case.scf2 w wierszu zawierającym :FER korzystając z grep:

```
grep :FER *scf2
```

Case to nazwa folderu, w którym są wykonywane obliczenia. Ten plik z rozszerzeniem .insp także musi mieć w swojej nazwie nazwę folderu w pierwszym członie. Strukturę pasmową rysuje się wywołując:

```
x spaghetti
```

Rysunek znajduje się w pliku case.spaghetti\_ps a dane są zapisane w case.spaghetti\_ene.

## 2.3 Gęstość stanów

Gęstość stanów policzymy w terminalu i najpierw trzeba zadać gęstszą siatkę  $\mathbf{k}$ :

```
x kgen
```

Proszę wpisać 24<sup>3</sup>. Następnie wykonuje się dwa kroki obliczeń, flaga -qtl pozwoli wyznaczyć gęstość stanów rzutowaną na orbitale atomowe:

```
x lapw1
x lapw2 -qtl
```

Wywołanie programu

```
configure_int_lapw
```

pozwała zadać jakie gęstości chcemy zapisać do pliku. Na koniec należy wywołać

```
x tetra
```

a obliczone gęstości stanów znajdują się w plikach case.dos1ev, case.dos2ev itd.

### 3 Sprawozdanie

Sprawozdanie w formacie pdf proszę przysyłać na teamsach.

W sprawozdaniu należy umieścić:

1. Krótki wstęp, w którym będzie cel wykonanych obliczeń oraz rysunek struktury z widocznymi nazwami atomów.
2. Sekcję szczegóły obliczeniowe, w której będzie zawarte:
  - Użyte oprogramowanie do obliczeń DFT i jednym zdaniem na jakiej metodzie bazuje.
  - Użyte parametry do obliczeń (stała sieci (jest to wartość literaturowa, wziąłem ją z userguida), potencjał wymiennie-korelacyjny, promień RMT, rozmiar siatki punktów  $\mathbf{k}$  do cyklu SCF i rozmiar siatki do gęstości stanów i powierzchni Fermiego).
3. Sekcję wyniki, w której będzie zawarte:
  - Jeden rysunek powierzchni Fermiego przedstawiający wszystkie płaty.
  - Rysunek elektronowej relacji dyspersji.
  - Rysunki elektronowej gęstości stanów (całkowita TiC i rzutowane na orbitale atomowe Ti i C; całkowita Ti i Ti-s, Ti-p, Ti-d; całkowita C i C-s, C-p). Proszę podać wartość całkowitej gęstości stanów na poziomie Fermiego  $N(E_F)$  i opisać jakie stany wnoszą główny wkład do  $N(E_F)$ .
4. Krótkie podsumowanie, w którym napisać co udało się zrobić i jaki jest wynik pracy.