

Metody ab initio w fizyce ciała stałego

Laboratorium 8

Gabriel Kuderowicz

14 stycznia 2026

1 Cel

Na dzisiejszych laboratoriach nauczymy się jak obliczać własności materiałów z domieszką używając metody superkomórki. Zrobimy to za pomocą pakietu WIEN2k na przykładzie półprzewodnika $\text{Pb}_{1-x}\text{Na}_x\text{Te}$. Na koniec zobaczymy demonstrację obliczeń dla cienkiej warstwy Bi_2Se_3 , związku z topologicznymi stanami powierzchniowymi.

2 Wprowadzenie

Już niewielka ilość domieszki może znacznie zmienić własności niektórych materiałów i na przykład w półprzewodnikach podstawia się tylko rzędu 0.01% atomów, żeby uzyskać typ-n czy typ-p. Periodyczność kryształu umożliwia zastosowanie periodycznych warunków brzegowych, co redukuje obliczenia do komórki prymitywnej. Jednak w rzeczywistych materiałach występują liczne defekty oraz domieszki mogą obsadzać różne pozycje w komórkach pierwotnego materiału.

Niemniej kody obliczeniowe oparte o periodyczność kryształu można wykorzystać do przybliżonego opisu domieszkowanych układów. Metoda superkomórki polega na powieleniu komórki prymitywnej n_i razy w każdym kierunku. W ten sposób powstaje nowa komórka z $n_x \cdot n_y \cdot n_z$ razy więcej atomami. W nowej komórce podstawiamy część atomów domieszką zgodnie z koncentracją domieszki.

Większa objętość V_d komórki w przestrzeni prostej oznacza, że komórka w przestrzeni odwrotnej ma mniejszą objętość V_r zgodnie ze wzorem

$$V_r = \frac{(2\pi)^3}{V_d}. \quad (1)$$

Okazuje się, że do obliczeń w superkomórce potrzeba odpowiednio mniej punktów \mathbf{k} . Informacja nie jest tracona, ponieważ rekompensata następuje w zwiększonej liczbie pasm.

3 Do zrobienia

3.1 Stworzenie superkomórki

Otwieramy katalog WIEN2k i `mkdir PbTe-Na; cd PbTe-Na`. Plik z komórką prymitywną nazywa się `PbTe.struct` i znajduje się w `/home/magazyn/fcs_przyklady`. Skopiujmy go tu i stwórzmy superkomórkę za pomocą `x supercell`

Wpisujemy nazwę pliku, po kolei po 2 komórki dla każdego kierunku oraz 0 do przesunięć atomów, 0 komórek próżni i wybieramy symetrię F.

W nowym pliku `PbTe_super.struct` jest teraz struktura naszej superkomórki. Podmieńmy 1 atom Pb w (0,0,0) atomem Na (trzeba zmienić nazwę atomu w wierszu oraz liczbę atomową na $Z=11$). Jakiej koncentracji domieszki odpowiada taka zamiana?

Następnie znajduje się właściwe operacje symetrii

```
sgroup -wi -wo PbTe_super.struct > PbTe-Na.struct
```

Nowa komórka `PbTe-Na.struct` jest gotowa do użycia. Zobaczmy ją w `xcrysdenie`.

3.2 Obliczenia SCF i włączenie SOC

1. Stwórzmy plik do `.machines` do obliczeń równoległych, które rozdzieli punkty \mathbf{k} (dwa procesory jak ich liczba jest podzielna przez 2 lub trzy procesory i na ostatnim reszta z dzielenia)

```
1:localhost:1
1:localhost:1
residue:localhost
```

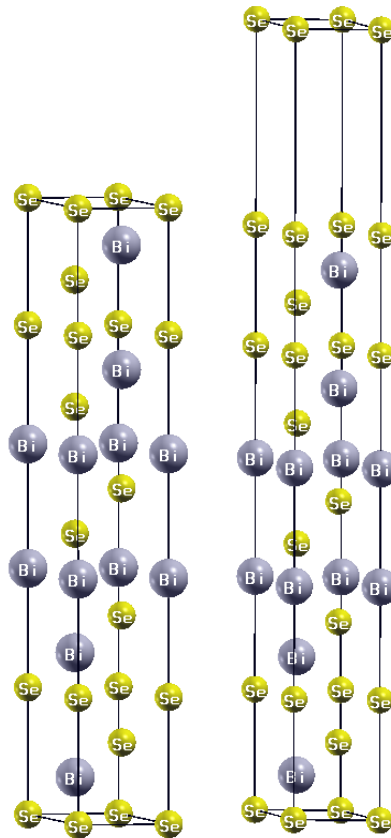
2. Inicjalizacja `init_lapw` - wszystko domyślne, PBE, siatka \mathbf{k} 6^3
3. Obliczenia równoległe `nohup run_lapw -p &`
4. `save_lapw -d nrel`
5. Inicjalizacja obliczeń ze sprzężeniem spin-orbita `initso_lapw` - wszystko domyślne
6. `nohup run_lapw -p -so &`
7. `save_lapw -d rel`

3.3 DOS

1. Zagęszczenie siatki `x kgen - 123`
2. `x lapw1 -p`
3. `x lapwso -p`
4. `x lapw2 -qtl -p -so`
5. `configure_int_lapw` - DOS całkowity oraz od każdego z 5 atomów
6. `x tetra -p -so`

3.4 Pasma

1. Kopiujemy plik `PbTe-Na.klist_band` z przygotowaną ścieżką Γ -K-X- Γ -L- Σ
2. `x lapw1 -band -p`
3. `x lapwso -p`
4. Kopiujemy plik `template.insp`, zmieniamy nazwę na `PbTe-Na.insp` i wstawiamy E_F odczytaną za pomocą `grep :FER *scf2`
5. `x spaghetti -p -so`



Rysunek 1: Komórka elementarna kryształu Bi_2Se_3 oraz superkomórka z próżnią ok. 10 \AA do obliczeń stanów powierzchniowych.

3.5 Bi_2Se_3

Bi_2Se_3 jest izolatorem topologicznym, czyli charakteryzuje się występowaniem przerwy energetycznej w kryształach, ale posiada stany przewodzące na powierzchni. Pojęcie topologii jest związane z tym, że pasma przy powierzchni przecinają i występują w odwróconej kolejności, ale nie istnieje ciągła transformacja, która pozwoliłaby przekształcić odwrócone pasma do takich dla zwykłego izolatora, dlatego te stany są chronione wobec zaburzeń. Takie zjawisko może wystąpić, jeżeli oddziaływanie spin-orbita jest silne oraz występuje złamanie symetrii translacyjnej, które jest oczywiste na krawędzi skończonego kryształu.

Jedną z własności izolatorów topologicznych jest blokowanie się spinu elektronów w kierunku prostopadłym do ich pędu. Izolatory topologiczne mają zastosowanie w optoelektronice, spintronice i mogą posłużyć w budowie komputerów kwantowych.

Stany powierzchniowe można wyznaczyć za pomocą obliczeń w kodach DFT przyjmując superkomórkę z próżnią. Więcej informacji można znaleźć w [tutorialu](#) a pliki wejściowe na [stronie](#). Nie wykonamy tych obliczeń na zajęciach, ponieważ zajmują wiele godzin. Przedstawię tylko wyniki.