

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

**ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ WIEN2K.
ЧАСТЬ 1.
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ
СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ.
ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ПЛОТНОСТЬ
СОСТОЯНИЙ**

Учебно-методическое пособие

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2015

СОДЕРЖАНИЕ

1. Описание программного пакета Wien2k.....	4
2. Запуск программы и начало работы.....	7
3. Моделирование кристаллической структуры	10
4. Этап инициализации расчетов	12
4.1. Уточнение кристаллической структуры.....	13
4.2. Построение атомной плотности заряда	14
4.3. Файлы с параметрами расчетов SCF-цикла	15
4.4. Формирование k-сетки	21
4.5. Построение начальной кристаллической плотности заряда	22
5. Цикл самосогласования (SCF-цикл)	22
6. Расчет характеристик электронной структуры.....	25
6.1. Вычисление плотности электронных состояний.....	25
6.2. Построение диаграммы энергетических зон.....	28
7. Пример расчета электронной структуры.....	32
Библиографический список	33

Схема SCF-цикла, в котором пакет Wien2k выполняет самосогласованное решение уравнения Шредингера–Кона–Шэма, приводится на рис. 2. Как видно, цикл состоит из пяти основных шагов: **LAPW0**, **LAPW1**, **LAPW2**, **LCORE**, **MIXER**. Кратко рассмотрим их назначение.

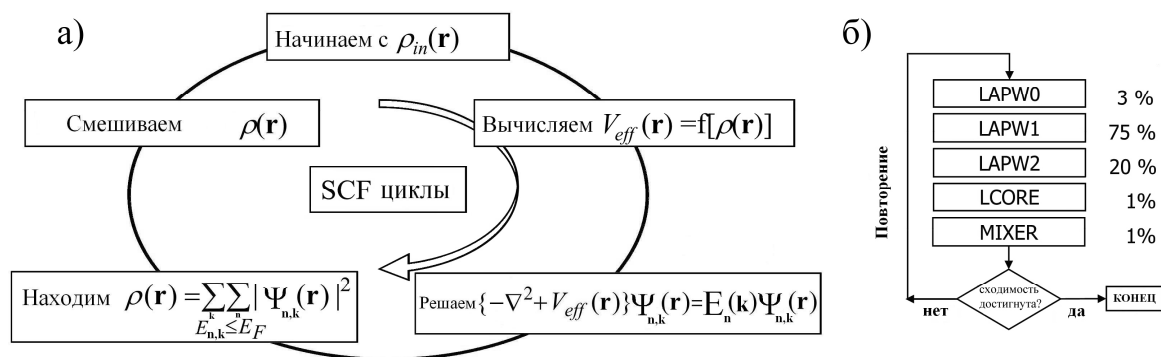


Рис. 2. а) Структура SCF- цикла. б) Распределение времени между подпрограммами SCF- цикла

Цикл самосогласования предназначен для решения уравнения Шредингера-Кона-Шэма, которое в случае кристалла имеет следующий вид

$$\hat{\mathbf{H}} \cdot \psi_{n,k}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \cdot \psi_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где гамильтониан $\hat{\mathbf{H}} = -\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$, n – номер энергетической зоны, \mathbf{k} – волновой вектор, $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ – эффективный одноэлектронный кристаллический потенциал, обладающий периодичностью решетки Бравэ рассматриваемого кристалла. Для того чтобы решить уравнение Шредингера–Кона–Шэма в кристалле, необходимо знать кристаллический потенциал $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$, для чего, в свою очередь, нам необходима электронная плотность $\rho(\mathbf{r})$. Последнюю мы можем получить, зная волновые функции $\Psi_{n,k}(\mathbf{r})$. Но сами волновые функции не известны, пока не решено уравнение Шредингера. Эта проблема разрешается следующим образом.

По завершении этапа инициализации в цикл самосогласования передается некоторое начальное значение электронной плотности ρ , сгенерированное ранее как суперпозиция электронных плотностей отдельных атомов. Затем в программе **LAPW0** решается уравнение Пуассона

$$\nabla^2 V_c = -8\pi\rho,$$

из которого находится кулоновская часть V_c кристаллического потенциала. Обменно-корреляционный потенциал V_{xc} определяется по одной из предлагаемых аппроксимаций в рамках приближений LDA или GGA. Полный по-

тенциал $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ вычисляется как сумма кулоновского V_c и обменно-корреляционного V_{xc} вкладов. Далее в программе **LAPW1** определяются собственные значения и собственные функции для валентных состояний, для чего решается уравнение (1) с полученным значением $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$. Из найденных на этом этапе волновых функций вычисляется валентная электронная плотность (программа **LAPW2**). На четвертом этапе (**LCORE**) вычисляются остовные состояния и остовная электронная плотность. На завершающем этапе (**MIXER**) полученные электронные плотности остовных, полуостовных и валентных состояний складываются в новую (выходную) полную электронную плотность, значение которой сравнивается со значением входной плотности. Если разница в значениях плотностей больше, чем некоторая предварительно заданная величина (критерий сходимости), определяющая точность расчета, то новая плотность передается на первый этап (**LAPW0**), и цикл повторяется вновь. В качестве критерия сходимости также можно использовать величину полной энергии приходящейся на элементарную ячейку. Итерации цикла будут повторяться до тех пор, пока не будет достигнуто требуемое значение точности. Затем происходит выход из цикла, и пользователь может проводить расчеты интересующих его электронных свойств исследуемого материала.

2. ЗАПУСК ПРОГРАММЫ И НАЧАЛО РАБОТЫ

Перейдем непосредственно к рассмотрению порядка работы с программным пакетом Wien2k. Для начала работы с программой необходимо запустить графический пользовательский интерфейс (GUI). Для этого в терминале (интерфейс командной строки в Linux) следует ввести команду «**w2web**». Затем нужно запустить интернет браузер и ввести в адресной строке «**http://localhost:7890**». Откроется окно ввода логина и пароля. После того как они будут введены, в рабочем окне браузера запустится окно создания/выбора рабочего сеанса пакета Wien2k (рис 3). Расчет свойств каждой новой структуры следует проводить в рамках нового сеанса.

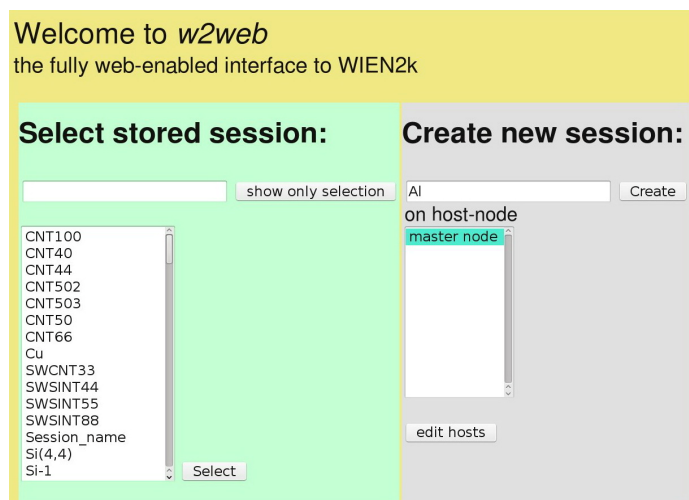


Рис. 3. Окно создания / выбора рабочего сеанса

Ä



главное окно **w2web** (графический интерфейс программы) (рис. 5).



Это окно разделено на несколько частей. В левом верхнем углу расположен логотип программы Wien2k. Справа от него указано имя рабочего сеанса и адрес рабочей папки. Если нажать на имя сеанса, то откроется окно создания / выбора рабочего сеанса. В правом верхнем углу окна расположено окошко статуса состояния программы. В нем указаны текущие время и дата, статус работы программы и кнопка обновления (**refresh**). Само окошко меняет свой цвет в зависимости от выполняемых программой действий (рис. 6). В режиме ожидания его цвет желтый, а рядом с часами отображается надпись «**idle**». Во время вычислений окошко статуса становится розовым, а рядом с часами после надписи «**running**» отображается название запущенной в данный момент программы. В случае аварийной остановки программы окошко статуса становится красным, а справа от часов появляется надпись «**error**». Нажав на нее, можно проверить текстовые файлы, содержащие отчет о произошедшей ошибке.

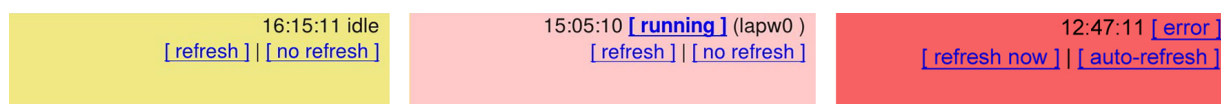


Рис. 6. Окно статуса в режиме ожидания (слева), выполнения расчета (в центре), сообщения об ошибке (справа)

В центре окна **w2web** на сером фоне расположена рабочая область. В ней будут отображаться кнопки выполнения действий, текстовые файлы ввода/вывода информации, графики и рисунки. Наконец, в левой части рабочего окна под логотипом Wien2k расположено меню с доступными вариантами выбора действий. Описание важнейших функций приведено в таблице 1.

Т а б л и ц а 1

Описание меню пакета Wien2k

Меню	Подменю	Назначение
Execution (исполнение)	StructGen	Открывает генератор кристаллической структуры
	view structure	Отображает кристаллическую структуру в программе XCrysDen
	initialize calc.	Открывает окно предварительных вычислений
	run SCF	Открывает окно настройки SCF-цикла
	single prog.	Открывает окно выборочного запуска подпрограмм

Utils (утилиты)	show stdout	Отображает отчет выполняемой программы
	show dayfile	Отображает отчет выполнения SCF-цикла
	stop SCF	Останавливает SCF-цикл
Tasks (задания)	El. Dens.	Запускает программу построения электронной плотности
	DOS	Запускает программу построения DOS
	XSPEC	Запускает программу построения рентгеновских спектров
	TELNES.3	Запускает программу построения спектров характеристических потерь электрона
	OPTIC	Запускает программу построения оптических спектров
	Bandstructure	Запускает программу построения диаграммы энергетических зон

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Непосредственная работа по вычислению свойств материала начинается с процесса задания его кристаллической структуры. Для этой цели служит программа **StructGen**. Для ее запуска нужно нажать на одноименную гиперссылку в меню **Execution** в левой части рабочего окна программы. В открывшемся окне в строке «**Number of atoms**» следует указать число неэквивалентных атомов* в создаваемой структуре и нажать на **Generate template**.

**Неэквивалентными являются не только атомы различных химических элементов, но и атомы одного элемента, находящиеся в неэквивалентных кристаллографических позициях.*

Откроется окно задания параметров кристаллической структуры (см. рис. 7). В нем необходимо заполнить поля с параметрами кристаллической структуры. В строке «**Title**» – название структуры (не влияет на результаты расчета). В окне «**Lattice**» – тип решетки Браве или номер пространственной группы симметрии моделируемого материала. Затем в окне «**Lattice parameters in**» нужно выбрать рабочую единицу длины (ангстремы (10^{-10} м) или атомные единицы ($5,2917720859(36) \times 10^{-11}$ м)). Далее, в строках «**a=**», «**b=**», «**c=**» указываются параметры кристаллической решетки вдоль соответствующих направлений, а в строках « **α =**», « **β =**», « **γ =**» – соответствующие углы.

Теперь в первом окне строки «**Atom 1**» следует указать международное обозначение атома. Общее количество таких строк равно количеству неэквивалентных атомов, которое было указано ранее, однако в дальнейшем оно может быть изменено. Атом можно удалить, нажав на **remove**. Атому данного сорта можно добавить новую кристаллографическую позицию, нажав **add position**. Можно отделить одну из позиций от атома, создав новый неэквивалентный атом, нажав на **split**. Если в структуре присутствуют несколько атомов одного химического элемента, но нужно, чтобы они рассматривались как неэквивалентные, то во втором окне строки «**Atom 1**» добавляется числовая метка (1/2/3 и т.д.). В строке «**Pos 1**» в полях «**x=**», «**y=**», «**z=**»