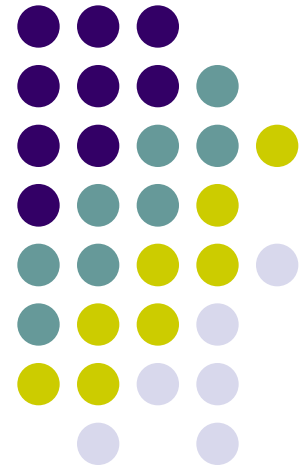
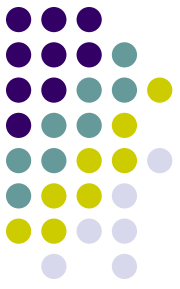


Zastosowanie metod typu 'ab-initio' do badania właściwości materiałów

dr inż. Krzysztof Zberecki

WYKŁAD 1 – Wstęp





Cele wykładu

- Główny cel – nabycie praktycznych umiejętności korzystania ze współczesnych metod obliczania właściwości materiałów
- Wykład – część teoretyczna (10)
- Laboratorium – część praktyczna (5)
- Problemy
 - struktura elektronowa ciała stałego
 - zjawiska dynamiczne w ciele stałym
 - ...
- Narzędzia
 - metoda funkcjonału gęstości (DFT)
 - praktyczna realizacja DFT – metoda Kohna-Shama



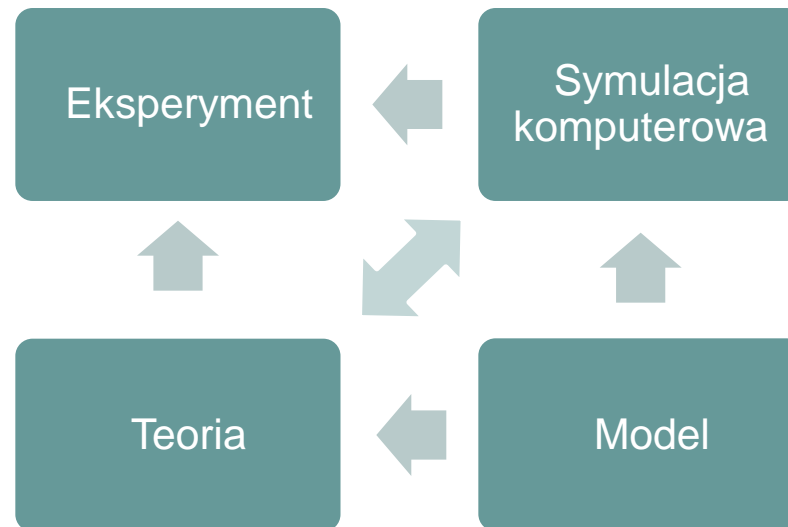
Plan wykładu

1. Wstęp i cele, przedstawienie problemu
2. Metoda T-F, przedstawienie formalizmu DFT – twierdzenie H-K i metoda K-S
3. Podstawowe metody obliczania struktury pasmowej ciał stałych – OPW, APW
4. Szczegóły metody DFT
5. Metoda FLAPW/APW+lo, metoda pseudopotencjału
6. Omówienie kodów numerycznych
 1. WIEN2k (pełny potencjał)
 2. ABINIT, QuantumEspresso (pseudopotencjał)
 3. Siesta (pseudopotencjał + zlokalizowana baza)
7. Przegląd literatury
8. Zakończenie - perspektywy



Symulacje komputerowe

- Rola symulacji komputerowych
 - Zapewniają tak ilościowe jak i jakościowe wyniki
 - Pozwalają przenieść eksperymenty z laboratorium do komputera
- Moc obliczeniowa – prawo Moore’a
- Związek modelu z symulacją i eksperymentem





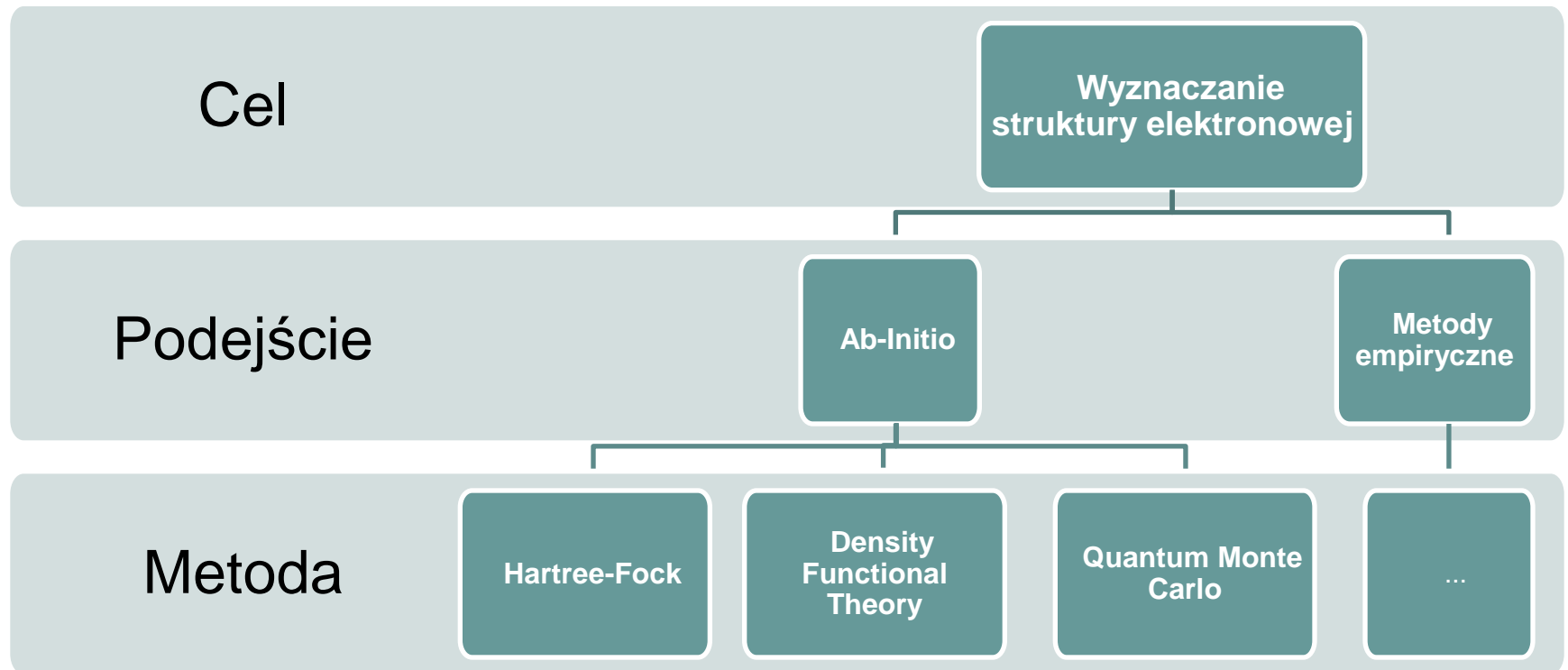
Ab-Initio

- Metody obliczeniowe z pierwszych zasad – nie zawierają żadnych danych empirycznych (R. Parr, 1950)
- W tym przypadku – metody oparte o DFT
- Pozwalają uzyskać przy użyciu podejścia mikroskopowego wielkości mierzalne eksperymentalnie
- W tym przypadku
 - Struktura pasmowa
 - Dynamika sieci – widmo fononów
 - Zjawiska optyczne
 - ...
- „Use-inspired basic research”

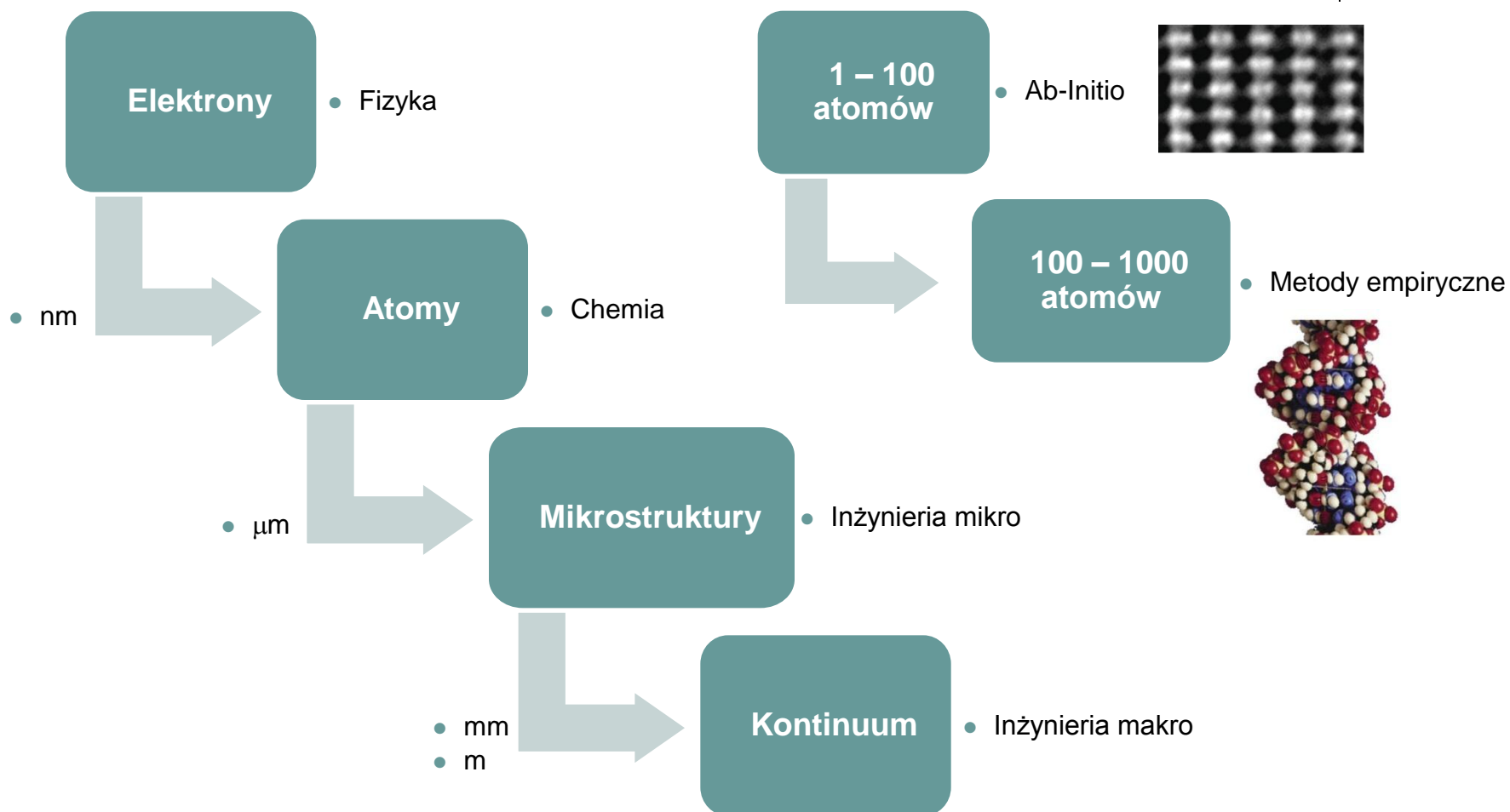
Quest for fundamental understanding?	Yes	Pure basic research (Bohr)	Use-inspired basic research (Pasteur)
	No	--	Pure applied research (Edison)
		No	Yes
		Considerations of use?	



Cel, podejście, metoda



Skale





Ciało stałe – niezbędne podstawy

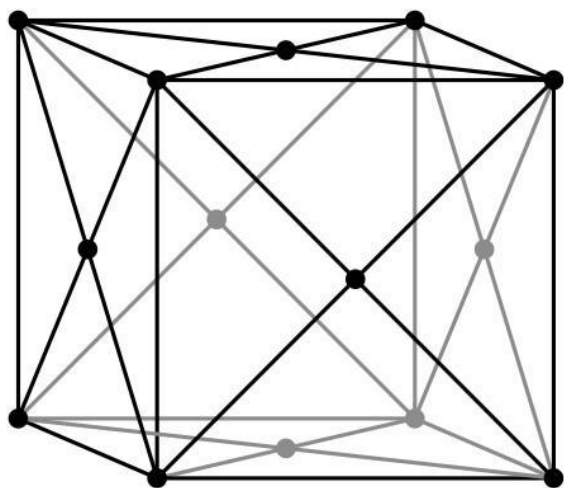
- Budowa
 - sieć krystaliczna
 - symetrie
- Struktura elektronowa
 - sieć odwrotna
 - struktura pasmowa
- Wiązania w ciele stałym
 - jonowe, kowalencyjne, metaliczne, molekularne
- Układ kwantowy
 - wiele cząstek
 - oddziaływania
 - pole średnie



Ciało stałe – budowa

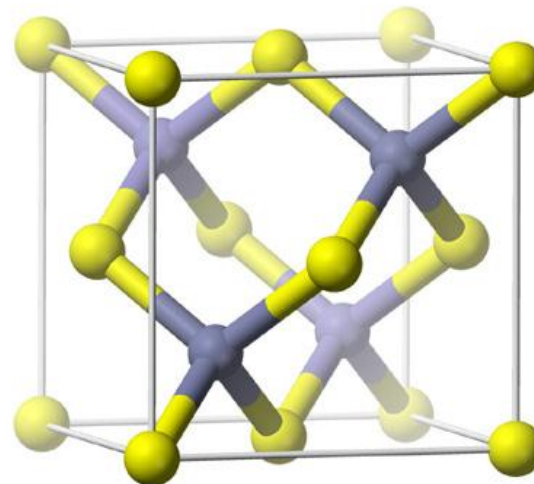
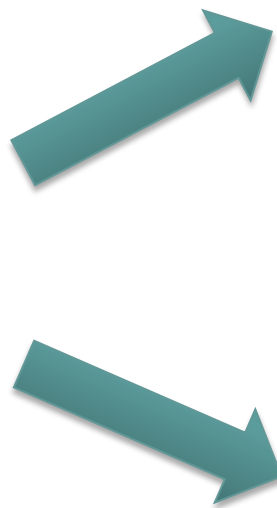
- Ciało stałe: krystaliczne vs. amorficzne
- Ciało krystaliczne: monokryształ vs. polikryształ
- Sieć krystaliczna
 - układ atomów charakterystyczny dla danego ciała stałego
 - sieć krystaliczna = sieć Bravais + baza
 - komórka elementarna vs. komórka prymitywna
- Symetrie:
 - grupa punktowa vs. grupa przestrzenna
- Parametry charakt. strukt. krystaliczną
 - parametry sieci, liczba koordynacyjna, odległości między atomami, liczba atomów w komórce, współczynnik upakowania, ...

Ciało stałe – budowa

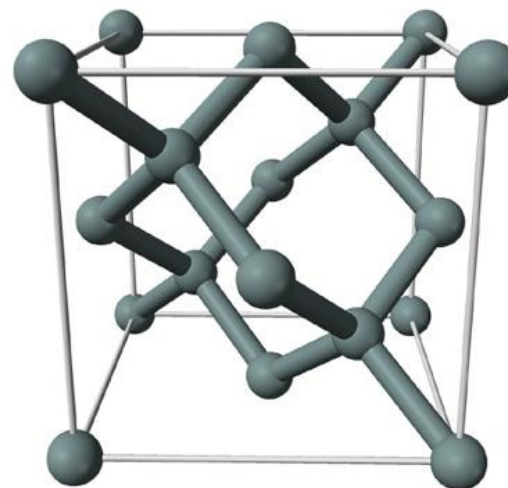


f.c.c.

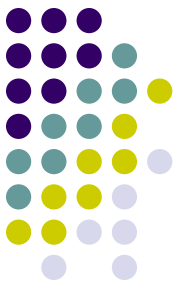
sieć + baza = struktura



GaAs



Si



Ciało stałe – struktura elektronowa

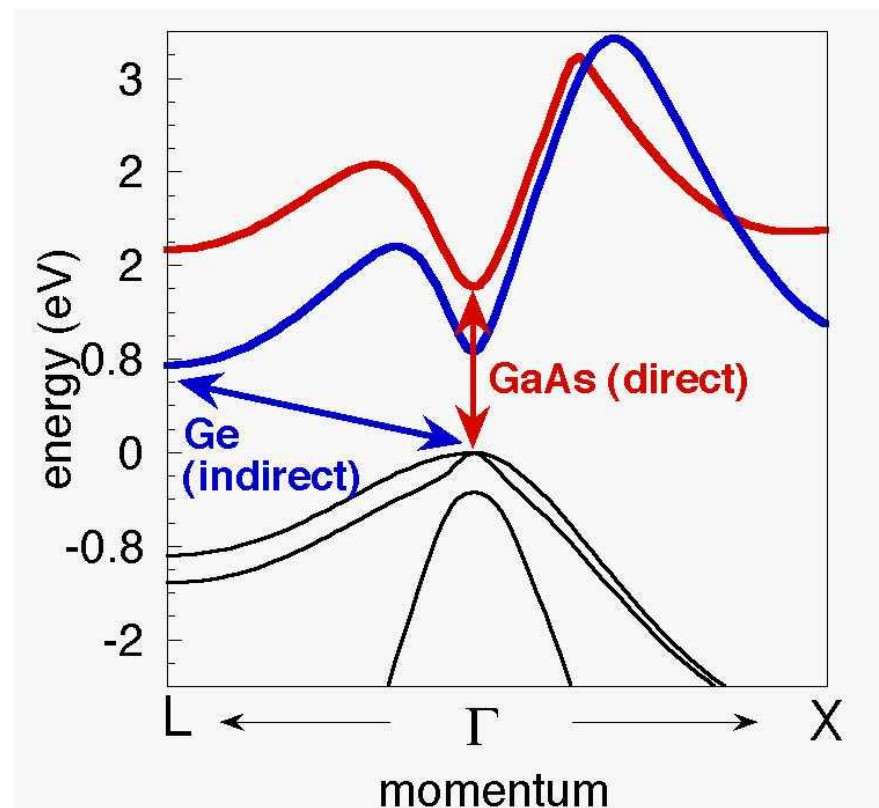
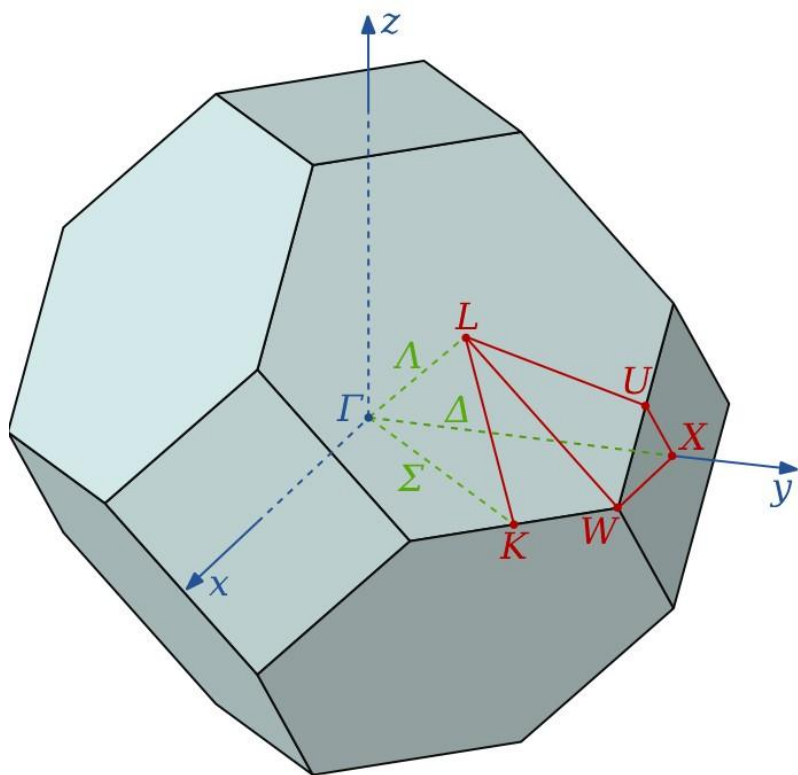
- Krysztal ma strukturę periodyczną
- Stany elektronowe w krysztale można w przybliżeniu średniego pola otrzymać z rozwiązania jednocząstkowego równania Schroedingera z potencjałem efektywnym mającym periodykę sieci krystalicznej
- Tw. Blocha: każdy stan elektronowy w krysztale jest scharakteryzowany przez wektor falowy \vec{k} , funkcja falowa stanowi zmodyfikowaną falę płaską z modulacją określoną przez sieć krystaliczną

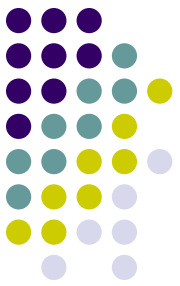
$$\Psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r})$$

- Dozwolone wartości wektora \vec{k} można znaleźć wykorzystując periodyczne warunki brzegowe
- Wektory falowe \vec{k} można wyrazić za pomocą liniowych kombinacji wektorów podstawowych sieci odwrotnej

Struktura elektronowa ciała stałego zatem również zależy od \vec{k}

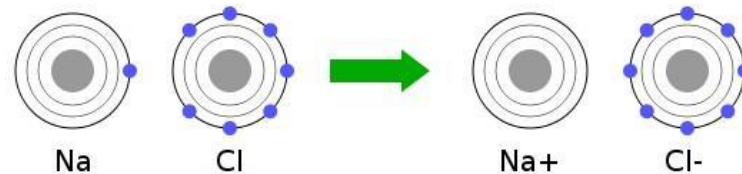
Ciało stałe – struktura elektronowa



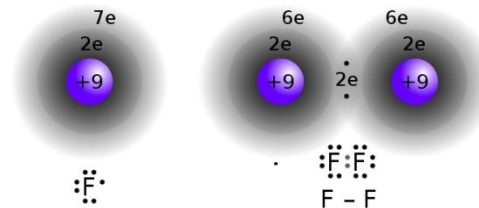


Ciało stałe – wiązania

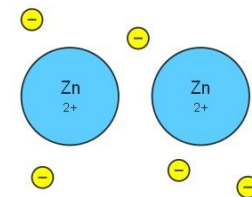
- Istnienie ciał stałych świadczy o występowaniu sił międzyatomowych
- W zależności od wzajemnego oddziaływania atomów (jonów) wyodrębnia się:
 - wiązania jonowe – występują między atomami różniącymi się znacznie elektroujemnością (np. NaCl)



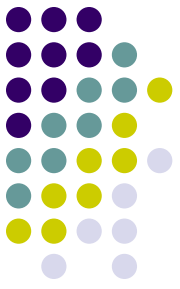
- wiązania kowalencyjne – czysto kwantowe, występują np. w półprzewodnikach III-V (np. GaAs), półprzewodnikach IV grupy ukł. okr. (np. Ge, Si), cząsteczkach pierwiastków (np. F)



- wiązania metaliczne – występują w metalach (np. Fe)



- wiązania molekularne (van der Waalsa) – występują w kryształach molekularnych (np. zestalonych gazów szlachetnych)



Ciało stałe – układ kwantowy

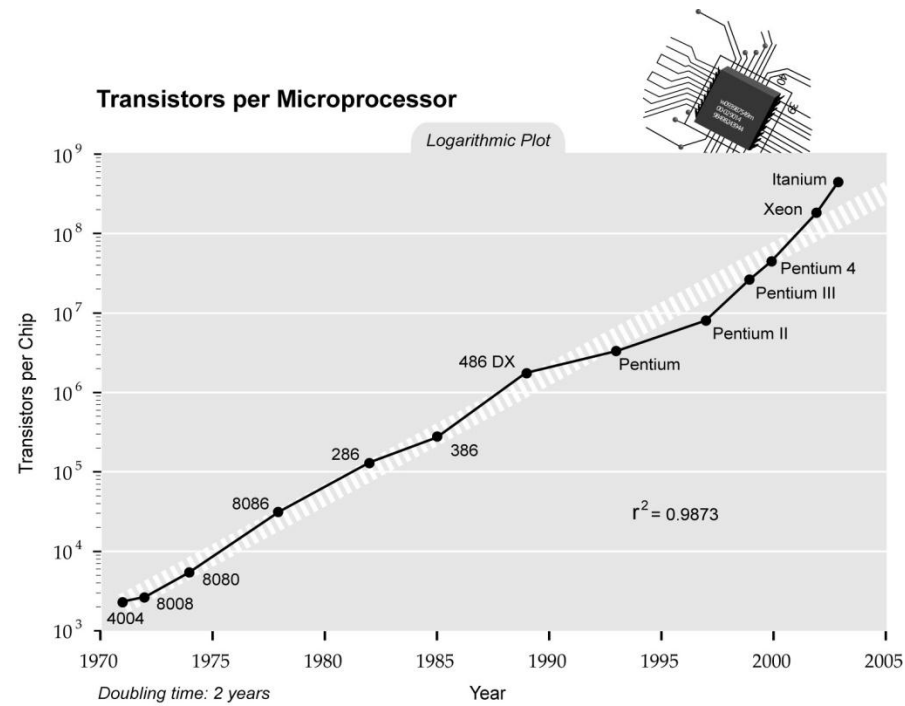
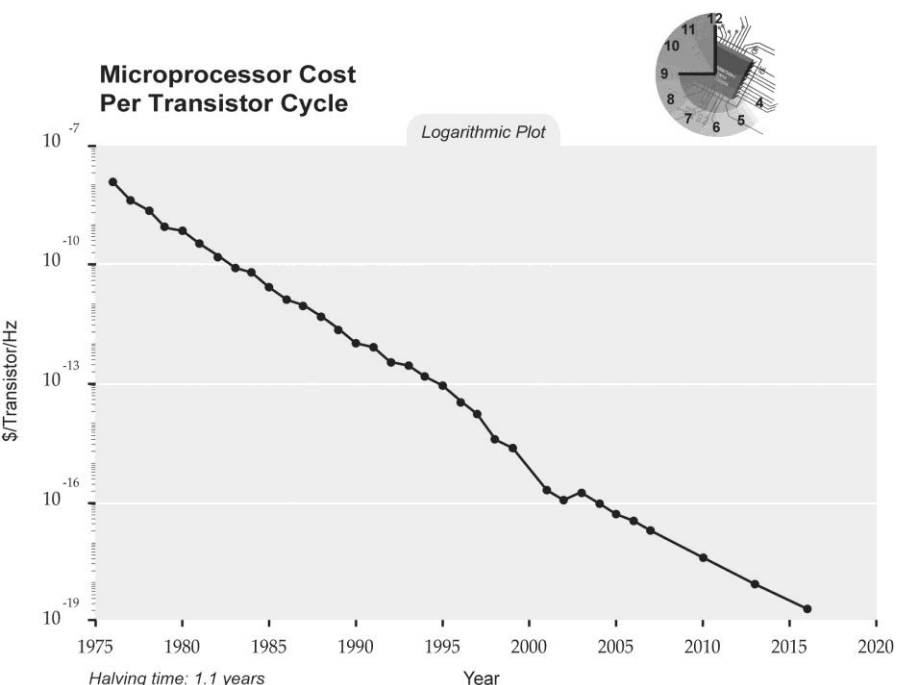
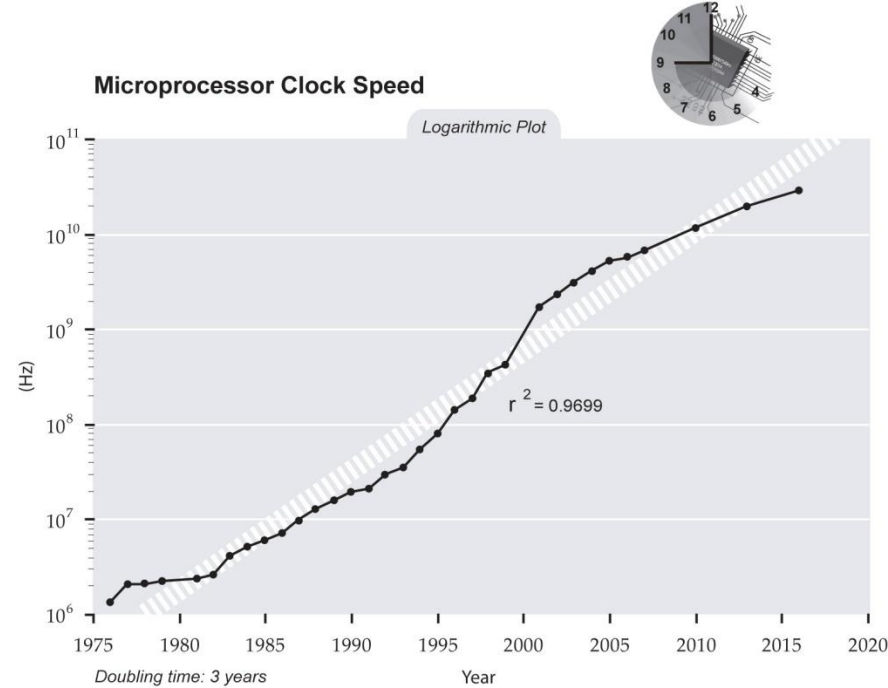
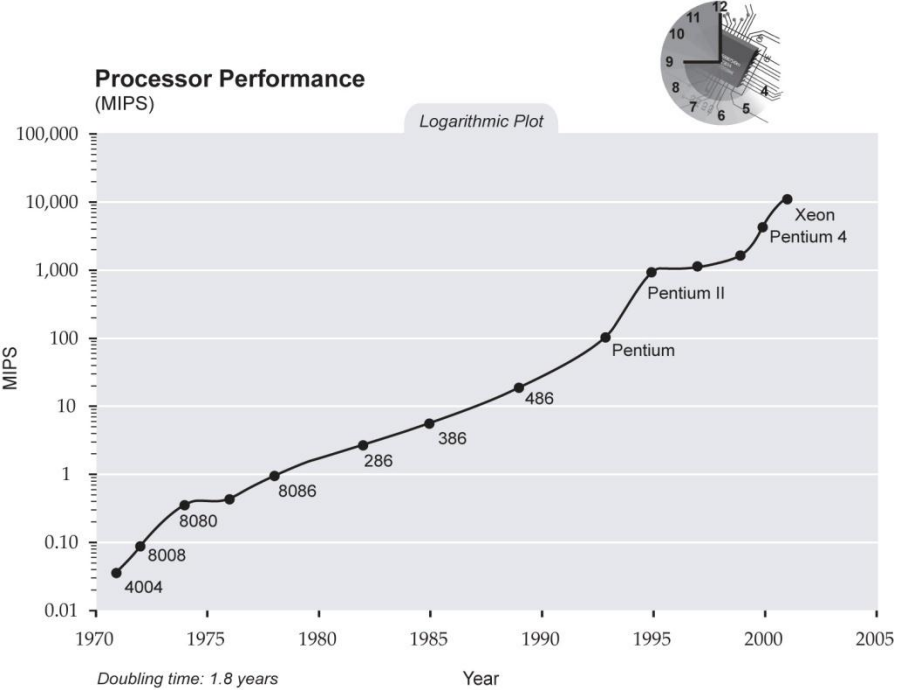
- Kwantowy układ wielu cząstek
 - funkcja falowa
 - zasada wariacyjna
- Problemy interpretacyjne
 - „katastrofa Van Vlecka”
- zagadnienie wieloelektronowe w ciele stałym
 - hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}$$

- niezbędne przybliżenia

Appendix





Podsumowanie

