

計算科学レポート 1

学籍番号 35-196004 天野智仁

1 Al のバンドと DOS の計算

1.1 DOS 計算

Al の DOS の計算の為に、まずは scf 計算を行った。exercise1 では、ファイル Al.sample.in による scf 計算で最適な degauss と nk の値を求める。Al.sample.in はソースコード 1 に与えられている。

Listing 1: Al.sample.in

```
1 &control
2   calculation = 'scf',
3   verbosity = 'high'
4   prefix = 'Al_exc1'
5   outdir = './tmp/'
6   pseudo_dir = '../pseudo/'
7 /
8 &system
9   ibrav = 2,
10  celldm(1) = 7.65,
11  nat = 1,
12  ntyp = 1,
13  ecutwfc = 25.0,
14  occupations = 'smearing',
15  smearing = 'marzari-vanderbilt',
16  degauss = 0.02
17 /
18 &electrons
19   mixing_beta = 0.7
20 /
21
22 ATOMIC_SPECIES
23 Al 26.98 Al.pz-vbc.UPF
24
25 ATOMIC_POSITIONS (alat)
26 Al 0.0 0.0 0.0
27
28 K_POINTS (automatic)
29 8 8 8 1 1 1
```

結晶は primitive cell の原点に一つだけ Al を含む FCC 構造である．これは実際に xcrysden で図示することができて，下图 1 のようになる．

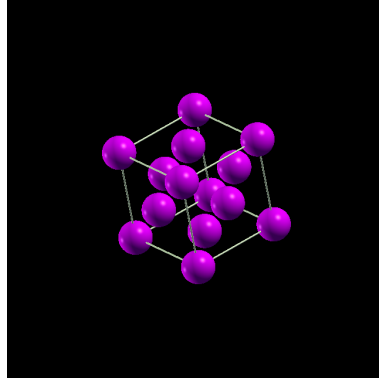


図 1: Al の結晶構造

degauss と nk に対する繰り返し計算は， $k = 6, 78, 12, 16$ および $degauss = 0.02$ から 0.02 刻みで 0.10 までで行った．その結果は図 2 に示されている．degauss の性質から，degauss は小さい程正確な基底エネルギーを与えられると考えられるが，図 2 はこの様子を反映して，基底エネルギーが degauss に関する単調増加の関数になっている．一方で nk は大きいほど良いが，degauss が 0.02 の時の値を見て見ると，nk は 8 でも既に 16 の時の値と高い精度で一致しており，計算量低減の為に nk は 8 で計算することにした．scf 計算によって得られた Total Energy は $-4.1867883 Ry$ ，Fermi Energy は $7.6495 ev$ である．

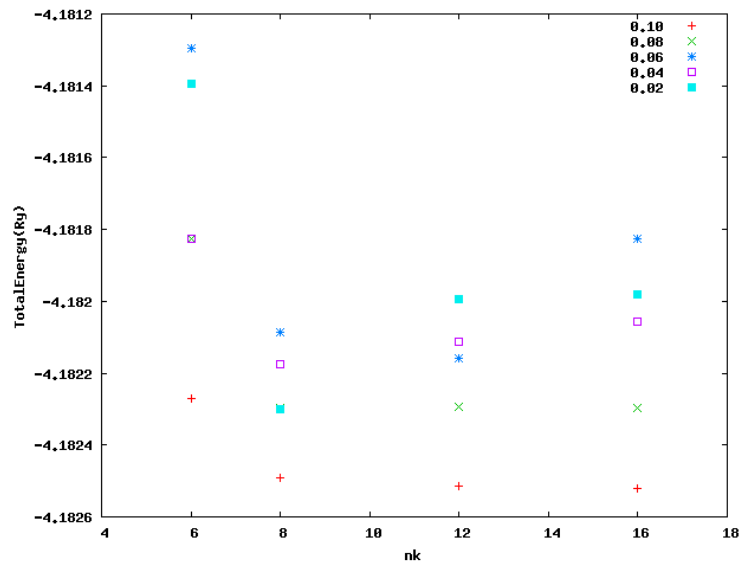


図 2: degauss に関する繰り返し計算

この結果を用いて，nscf の計算を行った．nscf 計算を行う際の scf からの変更点を図にまとめた．

1 &CONTROL

```

2  calculation='nscf'
3
4  &SYSTEM
5  occupations='tetrahedra'
6
7  &K_POINTS
8  16 16 16 1 1 1

```

nk を scf 計算の時の 2 倍に増やす理由は、より細かい k 点での計算を行うためである。

これらを元に、DOS の計算を行う。DOS の計算は Fermi Energy を基準にとって図 3 に図示した。

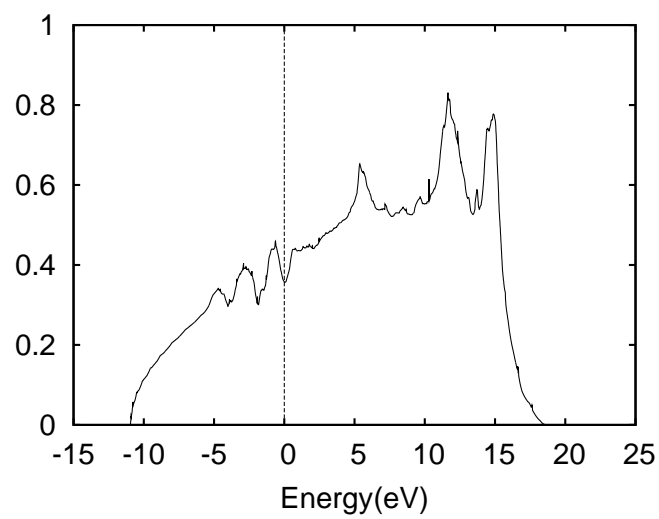


図 3: Al の DOS 図

また電荷密度の計算も行い、conventional cell の一面について図 4 に示した。

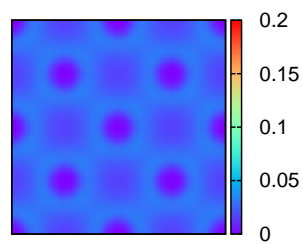


図 4: Al の電荷密度

1.2 bands の計算

band の計算にも, DOS と同じ scf 計算の結果を用いた. すなわち degauss は 0.02, k メッシュは 8 である. nscf 計算を band 計算用に実行し直す. 変更点を図にまとめた.

```
1 &control
2 calculation = 'bands'
3
4 K_POINTS{tpiba_b}
5 6
6 gG 30
7 X 30
8 W 30
9 L 30
10 gG 30
11 K 30
```

この計算を元に得られた band 図が, 図 5 である. ただし基準をフェルミ面にとってある. バン

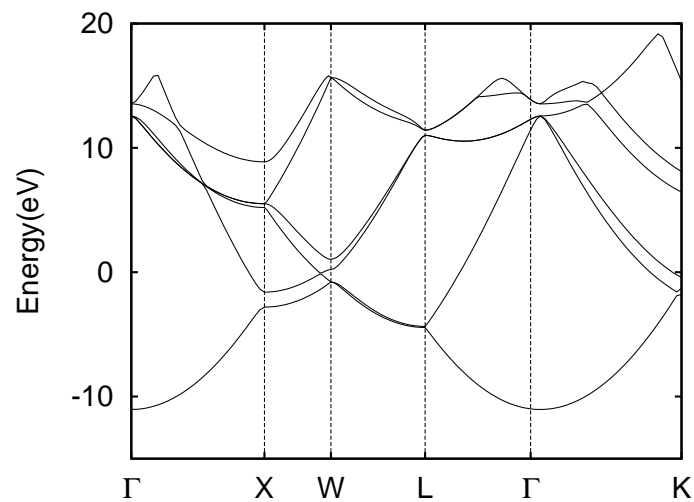


図 5: Al のバンド図

ド図を見ればわかるように Al は金属である. K-path の取り方は図 6 に示されている通りである.

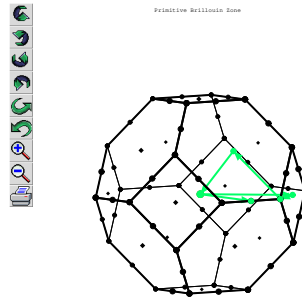


図 6: K-path の取り方

2 Cu のバンド計算

Cu のバンド計算も Al と同様に行う。Cu は Al と同じ FCC 構造であるから，原子の種類を Al から Cu に変更し（同時に擬ポテンシャルも変更する）格子定数を変更するだけで系の設定は十分である．それに加えて設定上の問題から，prefix も変更した．

```

1  &CONTROL
2  prefix = 'Cu_exc3'
3
4  &SYSTEM
5  a = 3.61496
6
7  &ATOMIC_SPECIES
8  Cu 63.546 Cu.pz-d-rrkjus.UPF

```

まず初めの degauss と nk に関する繰り返し計算の結果が図 7 である．今回も同様に，degauss を 0.02, nk を 8 で計算すれば十分であろう．また，この時の全エネルギー $-87.85031985 Ry$ ，フェルミエネルギーは $13.6131 ev$ であった．

次に band 計算のための nscf 計算を行い，バンド図 8 を得た．バンド図においてフェルミエネルギーの下を占めている多数のバンドは d 電子由来のバンドであり，Cu の特徴がよく捕らえられているといえる．

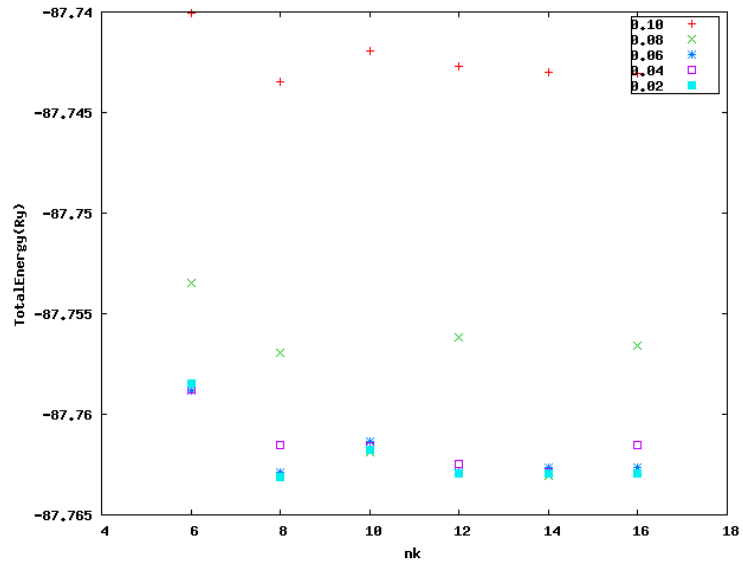


図 7: degauss の繰り返し計算

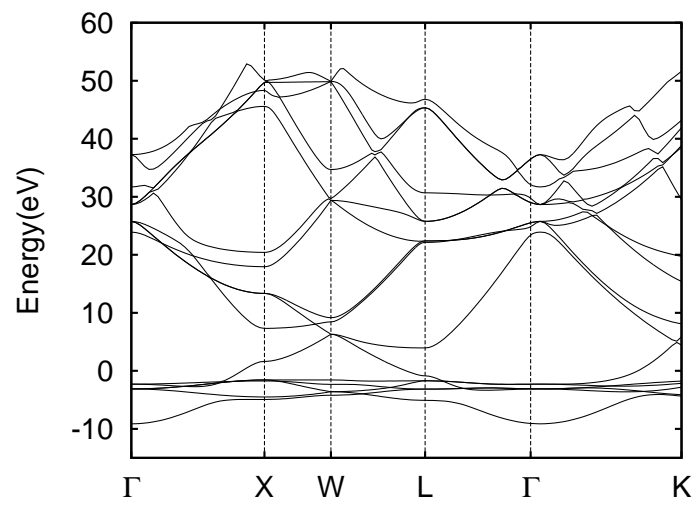


図 8: Cu のバンド図