

# 計算科学レポート 2

35-196004 天野智仁

## 1 wannier90 を使ったバンドのプロット

wannier90 を使って, wannier 基底を使った強束縛近似によるバンド計算を実行しよう.

### 1.1 QE による計算

まずはじめに scf 計算を実行した. 主なパラメーターは wannier90 のチュートリアルから変更せず, 図の値を使用した.

```
smearing='cold '  
degauss=0.02  
pseudo potential Cu.pz-n-van_ak.UPF  
K_POINTS(automatic)  
16 16 16 0 0 0
```

scf 計算の結果得られた TotalEnergy は  $-121.12133546\text{Ry}$ , FermiEnergy は  $12.2101\text{eV}$  であった. これを元に (001) 面での電荷密度を図示したのが図 1 である. 図 1 は, Cu のサイトに電子が強く局在している様子を表している. これは Cu が 3d 金属であることに由来し, 局在する d 軌道の様子が表れていると考えられる.

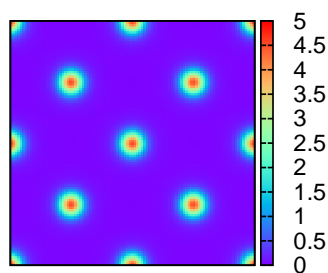


図 1: Cu の電子密度分布

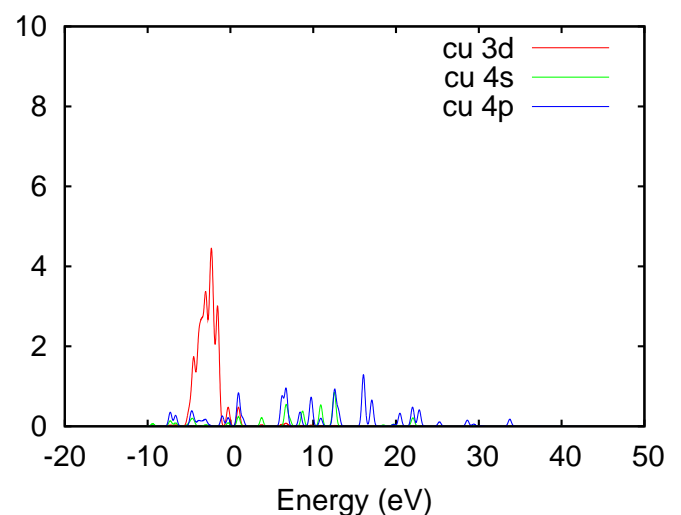


図 2: Cu の各軌道の DOS

このことを確かめるために、各軌道の状態密度を図2に示した。これを見ればわかるように、3d軌道がFermi 準位の直下に強いDOSを持っており、ここに電子が沢山いることを示している。このことは、QE によるバンド図3からも確認することができる。ここではエネルギーがフェルミエネルギーを基準にして示されているが、その下  $-2\text{eV}$  の所に集中的にあるバンドが3d 軌道である。

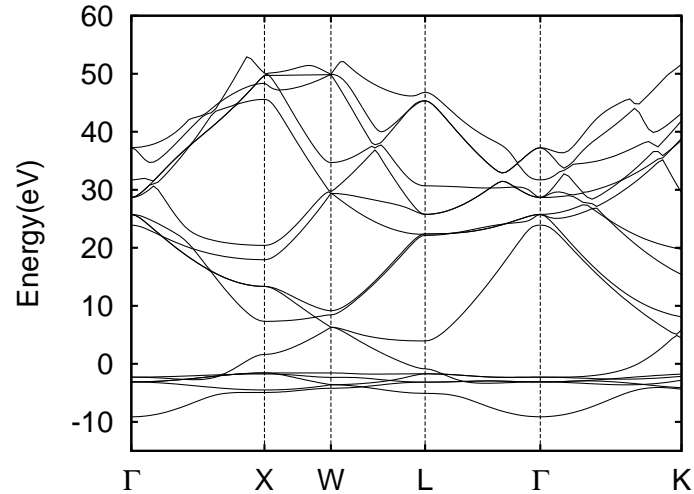


図 3: QE による Cu のバンド図

以上の考察から、Cu では、d 軌道を用いた強束縛近似がバンドを QE での計算をうまく再現することが予想される。

## 1.2 wannier90 の計算

wannier90 の細かい設定を記述していこう。基本的に wannier90 のチュートリアルと全く同じである。まず、バンドの数 (nscf と一致) 及びワニエ関数の数の指定は

```
num_bands = 12
num_wann = 7
```

とした。Outer window, Inner Window の指定は QE のバンド図と見比べて

```
dis_win_max = 38.0
dis_froz_max = 13.0
dis_num_iter = 50
dis_mix_ratio = 1.0
```

とした。計算ではまず、Cu のフェルミ面の計算を行った。(図 4)

計算の結果得られた wannier のバンド図と QE のバンド図 3 を重ねて表示したものが図 5 である。ここでは緑が QE によって得られたバンド、赤が Wannier90 によって得られたバンドである。

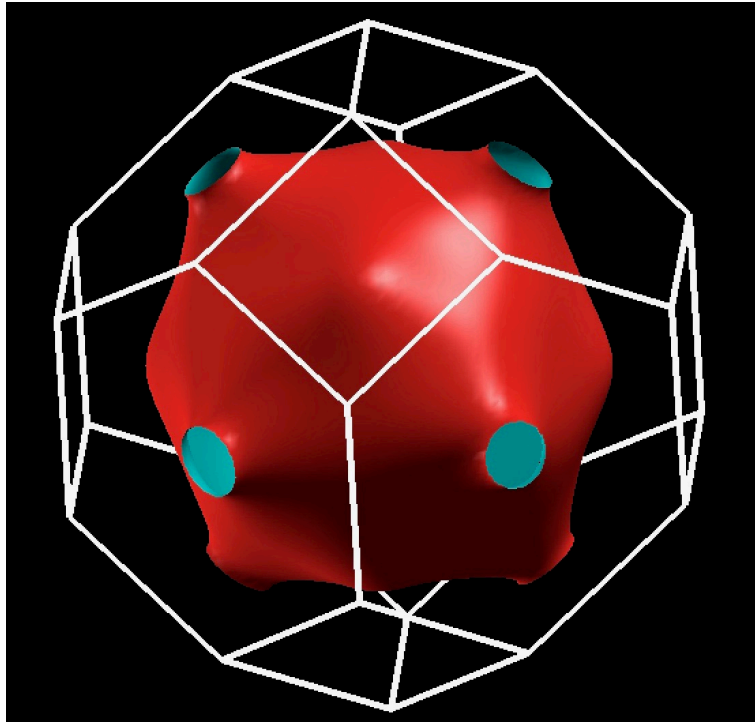


図 4: Cu のフェルミ面

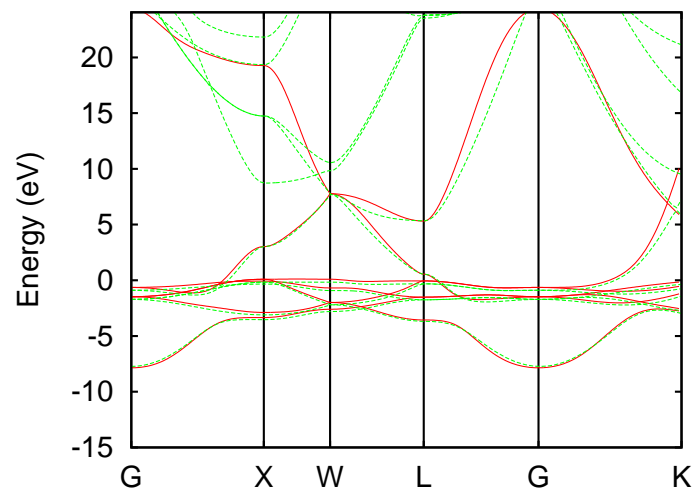


図 5: QE と Wannier90 のバンド図の比較