

First-Principles Quantum Matter Simulation Workshop

@Universitas Negeri Malang

<https://github.com/artnugraha/um-workshop-2025>

Ahmad Ridwan Tresna Nugraha

Pusat Riset Fisika Kuantum

Badan Riset dan Inovasi Nasional

ahmad.ridwan.tresna.nugraha@brin.go.id

30 Juni - 1 Juli 2025

Daftar Menu

- Pengenalan *density functional theory* (DFT)
- DFT dalam Quantum ESPRESSO
- Metode *Tight-Binding* (TB) dan Wannier90

Definisi dan Motivasi DFT

- Metode *first-principles* untuk memecahkan persamaan Schrödinger banyak elektron secara efisien sehingga sifat materi/material dapat dihitung tanpa parameter empiris.

Definisi dan Motivasi DFT

- Metode *first-principles* untuk memecahkan persamaan Schrödinger banyak elektron secara efisien sehingga sifat materi/material dapat dihitung tanpa parameter empiris.
- Menggantikan fungsi gelombang kompleks $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ dengan kerapatan elektron $n(r)$ yang lebih sederhana.

Definisi dan Motivasi DFT

- Metode *first-principles* untuk memecahkan persamaan Schrödinger banyak elektron secara efisien sehingga sifat materi/material dapat dihitung tanpa parameter empiris.
- Menggantikan fungsi gelombang kompleks $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ dengan kerapatan elektron $n(r)$ yang lebih sederhana.
- Dapat digunakan untuk sistem kristal maupun molekuler.

Teorema Hohenberg-Kohn

Teorema 1

Terdapat korespondensi satu-satu antara $n(r)$ dan potensial eksternal $V_{\text{ext}}(r)$.
(Hamiltonian \leftrightarrow fungsi gelombang keadaan dasar)

Teorema Hohenberg-Kohn

Teorema 1

Terdapat korespondensi satu-satu antara $n(r)$ dan potensial eksternal $V_{\text{ext}}(r)$.
(Hamiltonian \leftrightarrow fungsi gelombang keadaan dasar)

Teorema 2

Terdapat suatu fungsional universal $E[n]$ sehingga kerapatan $n(r)$ dari keadaan dasar akan meminimalkan energi total:

$$E[n] = T[n] + E_{\text{int}}[n] + \int V_{\text{ext}}(r)n(r)dr$$

Persamaan Kohn-Sham

Persamaan ini memperkenalkan sistem acuan tak-berinteraksi dengan $n(r)$ yang sama seperti sistem yang berinteraksi.

$$E[n] = T_s[n] + E_{\text{ext}}[n] + E_{\text{Hartree}}[n] + E_{\text{XC}}[n]$$

- $T_s[n]$: energi kinetik sistem tak berinteraksi
- $E_{\text{Hartree}}[n]$: gaya tolak-menolak elektron klasik
- $E_{\text{XC}}[n]$: energi pertukaran-korelasi (sisa efek benda banyak ditinjau di sini)

Perhitungan *Self-Consistent Field* (SCF))

1. Tebak $n(r)$ mula-mula
2. Hitung $V_{\text{eff}}(r) = V_{\text{ext}}(r) + V_{\text{Hartree}}(r) + V_{\text{XC}}(r)$
3. Selesaikan persamaan Kohn-Sham

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(r) \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r)$$

4. Perbarui $n(r)$

$$n(r) = \sum_{\text{occ}} |\psi_i(r)|^2$$

5. Cek konvergensi

Implementasi di Quantum ESPRESSO

- Basis set gelombang bidang (plane wave)
- Pseudopotensial untuk representasi suku-suku potensial selain V_{xc} .
- Modul utama:
 - pw.x: SCF, non-SCF
 - bands.x: struktur pita
 - dos.x: density of states
 - pp.x: visualisasi kerapatan
 - epsilon.x: sifat optik
 - ...

Contoh Input SCF

Eksekusi

```
pw.x -in scf.in > scf.out
```

```
&CONTROL
```

```
  calculation = 'scf',  
  prefix = 'Si',  
  outdir = './tmp',  
  pseudo_dir = './pseudo'
```

```
/
```

```
&SYSTEM
```

```
 ibrav = 2, celldm(1) = 10.26,  
  nat = 2, ntyp = 1,  
  ecutwfc = 30.0
```

```
/
```

```
&ELECTRONS
```

```
  conv_thr = 1.0d-8
```

```
/
```

```
ATOMIC_SPECIES
```

```
  Si 28.0855 Si.pz-vbc.UPF
```

```
ATOMIC_POSITIONS (alat)
```

```
  Si 0.00 0.00 0.00
```

```
  Si 0.25 0.25 0.25
```

```
K_POINTS automatic
```

```
  6 6 6 0 0 0
```

Non-SCF: Perhitungan pita energi

Eksekusi

```
pw.x -in scf.in > scf.out  
pw.x -in nscfbands.in > nscfbands.out  
bands.x -in bands.in > bands.out
```

```
&CONTROL  
  calculation='bands',  
  prefix='Si',  
  outdir='./tmp'  
/
```

```
&SYSTEM
```

```
  ...
```

```
/
```

```
&ELECTRONS
```

```
  ...
```

```
/
```

```
K_POINTS crystal_b
```

```
5
```

```
0.500 0.500 0.500 10 ! L
```

```
0.000 0.000 0.000 10 ! Gamma
```

```
0.500 0.000 0.500 10 ! X
```

```
0.625 0.250 0.625 10 ! U
```

```
0.000 0.000 0.000 10 ! Gamma
```

```
...
```

Non-SCF: Perhitungan *Density of States* (DOS)

Eksekusi

```
pw.x -in scf.in > scf.out  
pw.x -in nscfdos.in > nscfdos.out  
dos.x -in dos.in > dos.out
```

```
&CONTROL  
  calculation = 'nscf',  
  prefix = 'Si',  
  outdir = './tmp',  
  pseudo_dir = './pseudo'  
/  
&SYSTEM  
  ibrav = 2, celldm(1) = 10.26,  
  nat = 2, ntyp = 1,  
  ecutwfc = 30.0  
/
```

```
&ELECTRONS  
  conv_thr = 1.0d-8  
/  
ATOMIC_SPECIES  
  Si 28.0855 Si.pz-vbc.UPF  
ATOMIC_POSITIONS (alat)  
  Si 0.00 0.00 0.00  
  Si 0.25 0.25 0.25  
K_POINTS automatic  
  18 18 18 0 0 0
```

Alur Kerja QE Secara Umum

- SCF: Hitung energi total dan $n(r)$
- Non-SCF:
 - pita energi (hubungan dispersi)
 - kerapatan keadaan (DOS)
- *Post-processing*: sifat optik, sifat termal, dll.

Tips Praktis

- Periksa konvergensi terhadap `ecutwfc` dan k-point.
- Pilih *pseudopotential* (USPP, ONCV, dll.) yang cocok dengan fungsional pertukaran-korelasi (PZ/LDA, PBE/GGA, dll.).
- Dokumentasikan input dan output dengan baik.

Ringkasan DFT dalam QE

- DFT mengurangi kompleksitas masalah fungsi gelombang benda banyak menjadi fungsional kerapatan $n(r)$.
- Quantum ESPRESSO menyediakan paket komplet untuk komputasi material.
- Validasi konvergensi penting untuk hasil yang dapat dipercaya.

Motivasi Tight-Binding (TB) + Wannier90

- Fungsi Wannier: basis lokal yang merepresentasikan orbital terlokalisasi.
- Cocok untuk membangun model TB dari hasil DFT.
- Wannier90 memungkinkan:
 - Interpolasi struktur pita
 - Perhitungan sifat topologi, transpor, dll.
 - Visualisasi orbital

Formulasi metode TB

- Aproksimasi TB: menyatakan fungsi gelombang Bloch sebagai kombinasi linear orbital atomik

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R},\alpha} c_{n\mathbf{k},\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

- Mudah diekspresikan dalam basis terlokalisasi seperti fungsi Wannier
- Model sederhana yang cukup untuk menjelaskan banyak sifat elektronik

Fungsi Wannier dan TB

- Fungsi Wannier:

$$w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

- Maximally-localized Wannier function (MLWF): fungsi Wannier dengan lokalisasi maksimum (delokalisasi minimum)
- MLWF bertindak sebagai basis optimal untuk TB
- Elemen Hamiltonian TB:

$$H_{mn}(\mathbf{R}) = \langle w_m(\mathbf{0}) | \hat{H} | w_n(\mathbf{R}) \rangle$$

Hamiltonian TB dari MLWF

- Energi pita dapat diinterpolasi:

$$E_n(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}, m} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} H_{nm}(\mathbf{R})$$

- Matriks $H_{nm}(\mathbf{R})$ diperoleh dari MLWF
- TB berbasis MLWF menangkap sifat pita dalam rentang interval (window) energi target tertentu secara akurat

Interpolasi Wannier

- Menggunakan $H_{mn}(\mathbf{R})$, kita dapat menghitung pita pada lintasan vektor gelombang (k-path) sembarang tanpa kalkulasi DFT penuh
- Aplikasi:
 - Perhitungan kecepatan grup, massa efektif
 - Sifat transpor dan sifat topologi
 - Pemetaan permukaan Fermi beresolusi tinggi
- Jauh lebih cepat dibanding perhitungan DFT langsung

Alur Kerja Wannier90 + QE

Wannier90 menggunakan basis MLWF untuk interpolasi DFT menjadi model TB.

1. Hitung SCF (QE)
2. Hitung non-SCF dengan dense k-grid (QE)
3. Jalankan Wannier90 preprocessing
4. Generate file untuk Wannier90 (pw2wannier90.x)
5. Jalankan Wannier90 real run
6. Bandingkan pita energi TB dan DFT

Contoh Input wannier90.win

```
num_bands = 8
num_wann = 4

begin projections
Si : sp3
end projections

begin kpoints
8
0.0 0.0 0.0
0.5 0.0 0.0
...
end kpoints
```

Contoh Perintah dan File

- Jalankan SCF dan non-SCF:

```
pw.x < scf.in > scf.out
```

```
open_grid.x < open_grid.in > open_grid.out
```

- Preprocess dan generate data Wannier:

```
wannier90.x -pp Si
```

```
pw2wannier90.x < pw2wan.in > pw2wan.out
```

- Jalankan Wannier90:

```
wannier90.x Si
```


Visualisasi dan Validasi

- Plot pita energi DFT vs TB:
 - File output: `Si_band.dat`, `Si_band_tb.dat`
 - Python Matplotlib / Gnuplot untuk membandingkan
- Visualisasi fungsi Wannier:

```
xcrysden --wfs Si.amn Si.wout Si.mmn
```

Tips Praktis Wannier90

- Pilih `num_bands` cukup besar agar mencakup semua pita target.
- Proyeksi awal sangat mempengaruhi konvergensi.
- Validasi: band TB harus mengikuti band DFT di rentang energi target.

Ringkasan

- Wannier90 memungkinkan model TB akurat dari DFT.
- Berguna untuk studi transpor, topologi, dll.
- Workflow: QE \rightarrow wannier90 \rightarrow pw2wannier90 \rightarrow wannier90 \rightarrow analisis.