

# QM simulácie-projekt

May 29, 2020

## Zadanie

Oxid zinočnatý ZnO má široké uplatnenie v priemysle pri spracovaní gumy, cementu a i. Pri  $T=0$  K a nulovom tlaku má takzvanú wurtzite (WU) štruktúru, ktorá posobením tlaku prejde na rock salt (RS) mriežku. V rámci projektu preskúmajte nasledujúce vlastnosti:

- zobrazením závislosti entalpie od tlaku  $H = E + pV$  oboch fáz nájdite tlak  $p_c$ , pri ktorom nastane fázový prechod
- určite relatívnu zmenu objemu/hustoty pri prechode z fázy WU do fázy RS
- fitovaním Birch-Murnaghanovej stavovej rovnice

$$p(V) = \frac{3B_0}{2} \left( \left( \frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left( \frac{V_0}{V} \right)^{5/3} \right) \left( 1 + \frac{3}{4} (B'_0 - 4) \left( \left( \frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right) \right) \quad (1)$$

nájdite modul objemovej pružnosti  $B_0$  a jeho deriváciu podľa tlaku  $B'_0$  (obe hodnoty sú platné pre nulový tlak)

- vypočítajte elektrónovú štruktúru a zostrojte graf elektrónovej hustoty stavov a pásový diagram. Výsledky okomentujte (kov/izolant, rozdiely medzi elektrónovou štruktúrou vo fázach WU a RS, ...)
- vypočítajte a porovnajte frekvencie fonónových módov v  $\Gamma$  bode pre obe fázy. Výsledky skúste porovnať s experimentálnymi dátami aspoň pre fázu WU.

## Štruktúry

Štruktúry sú pribalené k zadaniu vo forme \*cif súborov. Sú vo formáte conventional standard cell, teda konvenčnej bunke ktorá má všetky symetrie kryštálu ale nie nutne minimálnu bázu. S primitívnou bunkou simulácie zbehnú rýchlejšie a navyše pre DOS, band diagram a fonóny v  $\Gamma$  bode je nutné počítať s primitívnou bunkou.

Konvenčná bunka WU sa dá transformovať na primitívnu maticou

$$\begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 & 0 \\ 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

a RS

$$\begin{pmatrix} 0 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

ale je oveľa pohodlnejšie využiť možnosti ponúkané Quantum Espressom v nastavení `ibrav`.