

# Dielectric function: epsPP0

---

epsPP0(2025-5-8 version)

During QSGW, we calculate  $\epsilon_{IJ}(q, \omega)$  for  $W$  in the GW calculation.

However, we need to calculate  $\epsilon(q, \omega)$  with larger number of k points to compare experiments.

Based on the no local-field correction equation  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ , we can calculate interband and intraband contributions separately.

The intraband contribution is the Drude weight at the limit  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ .

We use the command **epsPP0** now.

We include spherical Bessel functions in the MPB to expand  $\exp(i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ .

We can include local-field corrections with **eps\_lmfh** (in fact, we do include the local-field correction is QSGW iteration), but computationally expensive and not open to users currently.

## Computational steps

### Examples of **epsPP0**

It is instructive to learn things from samples as

- ecalj/Samples/EPS/GaAsEps
- ecalj/Samples/EPS/CuEpsPP0

Follow **job** files in these directories(**bash job** should work).

We explain the steps in **job** in the following steps.

You can start from only ctrl, GWinput. Then

```
gnuplot -p epsinter.glt
gnuplot -p epsintra.glt
gnuplot -p epsall.glt
```

Note that we usually need many k points if you like to have 0.1 level of error for dielectric constants (at the limit of  $\mathbf{q} = \omega = 0$ )

(e.g, reasonable results for GaAs may require **n1n2n3 20 20 20** in GWinput.)

- NOTE: to calculate  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$  without LFC accurately, the best basis set for the expansion of the Coulomb matrix within MT is apparently not the product basis, but the Bessel functions corresponding to the plane waves  $\exp(i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ . We include such a basis in this mode. (However, our experience shows that the changes are little even with the usual product basis).

step1: **lmf**収束計算行う。

sigmファイルがある場合は, QSGW計算による固有値固有関数からの誘電関数を計算することができる。

## step2: GWinputのパラメータを設定

- GWinput内でQforEPSで囲まれた箇所を探してください。

// defaultではこのように書かれている

```
QforEPSau on
<QforEPS>
0 0 0.00050
0 0 0.00100
0 0 0.00200
</QforEPS>
```

- この部分は誘電関数を計算するときの $\mathbf{q}$ ベクトルを設定しています。  
この値を変えることで誘電関数の $\mathbf{q}$ 方向の依存性を調べることができます。
- QforEPSau onがあるので、単位はa.u.になっています。すなわち、0 0 0.001であれば $\mathbf{q} = (0,0,0.001) \text{ bohr}^{-1}$ です
- もしQforEPSau onがない場合、 $\mathbf{q}$ の単位は $\frac{2}{\pi}a$ です。 $a$ は=alatでctrlで定義したものです。あるいはSiteInfo.chkに表示されています。

光学応答の場合は $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ としたいですが、そうすると今のコードでは数值的に不安定です。  
なので適宜小さくしてください。この不安定性は以下の図、ecalj/Samples/EPS/GaAsEpsで  
gnuplot -p epsinter.gltで100eVs弱のところに現れています。なのでたとえばGaAsEpsだと  
0,0,0.00050(EPS0001に対応)だとすこしにおおきくなっておりよろしくない、ということになります。  
gnuplotファイルepsinter.gltを見てください。

- エネルギーメッシュの取り方  
誘電関数を計算する際のメッシュは対数メッシュでとられており、GWinput内で

```
HistBin_dw      2d-3
HistBin_ratio 1.08
```

の値を変えることで、誘電関数のエネルギーメッシュを増やす(減らす)ことができます。メッシュを細かくとれば、誘電関数の構造がより現れるようになります。ただし、細かすぎると計算コストがすこし増えます。計算法はまずは虚部のウェイトをヒストグラムの蓄積したあと、実部はヒルベルト変換の方法で求めています。なので数值的にはまあまあ安定です。

- 計算メモリ量をへらしたい場合はGWinputに

```
KeepEigen False
KeepPbp False
```

等のコマンドを適宜書き込んで下さい。(we have to explain details...)

- QforEPSau on  
これはQforEPSのqをa.u.ではかるという意味になります。  
たとえば<QforEPS>に0d0 0d0 0.00005とあれば、これは  
 $q=(0d0\ 0d0\ 0.00005)/\text{bohr}$ と読んでください。  
(過去のQforEPSunita onと同じ意味)。  
確認するには、 $2\pi/\text{alat}$ をEPSファイル最初の3つの数字に乗じて  
<QforEPS>にかかっているqになるのをみます。
- 以前の--zmel0のオプションは2025-5-8で廃止しました。  
これはGramSchmidt2をsugw.f90に挿入して  
すこし正確な直行化が可能になったためです。
- epsPP0では最後にreadeps.pyを読んでて答えをまとめ上げてます。
- Cuの場合だと、qがあまりにゼロに近いと計算が不安定です。たとえば

```
QforEPSau on
<QforEPS>
0d0 0d0 0.00005
0d0 0d0 0.0001
0d0 0d0 0.0002
0d0 0d0 0.0004
0d0 0d0 0.0008
0d0 0d0 0.0016
0d0 0d0 0.0032
</QforEPS>
```

などとすると、0d0 0d0 0.00005のグラフがおかしいです。

それ以外のグラフはほぼ重なります。だた、0.0032ぐらいになると $\omega=0$ での実部がいくらかずれてきます。

- CuepsPP0ではフェルミ面の寄与もあり、

```
gnuplot -p epsintra.glt
```

を実行してフェルミ面の寄与が見れます。This is Drude weight、q分解で見れています。  
 $\omega=0$ 近傍でのふるまいはFetter-Waleckaにあるようにふるまっています。

```
gnuplot -p epsintra.glt
gnuplot -p epsall.glt
```

- epsPP0の計算が終わるとEPS000\*.n1fc.datというファイルがGWinputで設定したq点の数分作られます。この中は

```
// example EPS0001.nlfcdat
q(1:3)  w(Ry)  eps  epsi  --- NO LFC
0.01000000  0.00000000  0.00000000  0.0000E+00
0.276888086703565E+02  0.211273167660642E-17  0.361156744555281E-01
-0.275572453667495E-20
0.01000000  0.00000000  0.00000000  0.1015E-04
0.276873286605807E+02  0.424191214559347E-01  0.361175202203266E-01
-0.553348246663633E-04
0.01000000  0.00000000  0.00000000  0.3076E-04
0.276716446748960E+02  0.128515093142673E+00  0.361372966009293E-01
-0.167832020581202E-03
0.01000000  0.00000000  0.00000000  0.5200E-04
0.276450859807482E+02  0.197440420455938E+00  0.361709489903162E-01
-0.258331892398948E-03
0.01000000  0.00000000  0.00000000  0.7389E-04
0.276274571460234E+02  0.249411594405801E+00  0.361929258459201E-01
-0.326737828014011E-03
```

1~3行目にq点座標、4行目にエネルギー(Ry単位)、5・6行目が誘電関数の実部・虚部、7・8行目が誘電関数の逆数の実部・虚部が書かれています。

\*\* (改良計画) 誘電関数計算にはバンド吸収端で $(E-E_0)^{*.5}$ でキレイに立ち上がらない(GaAsなどの場合)、という数値計算上の問題があります。メッシュを細かく取るときれいにできることは示したことがあります。変な内挿法よりも必要なことだけ細かく取るという技法が有効だと思います。汎用化しないといけないです。

Test at 2016: we need to have correct edge  $\propto \sqrt{\omega-E_0}$ . To do so, we need to move to new method as

 new eps

\*\* (改良計画)  $q=0$ でのinterbandの寄与はu行列を使えば先に $1/q^2$ の割り算ができるのもっと直接的にできるはずです。

\*\* (修正するべき) 局所場補正

Local field correction with `eps_lmfh`

To include eps with LFC, do `eps_lmfh`. Expensive.

`lcutmx=2` seems to be good enough to get 0.5 percent error (maybe better than this).

Further we can use smaller `QpGcut_cou` like 2.2 or so, with rather smaller product basis (up to  $p$  times  $d$ , not including  $f$ ).

But we need checks and may be modification of `eps_lmfh`.

\*\* スピンゆらぎを計算するにはモデルを経由するべき

\*\* 要チェック(古いノート): We can use small enough delta. Use small enough delta ( $\approx 1e-8$  a.u.) for spin wave modes (also you can use it for dielectric function and GW). This can be meaningful because pole is too smeared if you use larger delta.

## old convergence test (2010)

- Convergence test for number of k point(specified by n1n2n3) test at 2010.  
Roughly speaking, 20x20x20 is required for not-so-bad results for Fe and Ni.  
It is better to do 30x30x30 to see convergence check.  
However, in the case of ZB-MnAs (maybe because of simple structure around Ef), it requires less q points.

Old figures of epsilon for GaAs (2010).

fig001: n1n2n3 convergence for Chi\_RegQbz = on case. (mesh including Gamma)

fig001

fig002: n1n2n3 convergence for Chi\_RegQbz = off case. (mesh not including Gamma)

fig002

fig003: Alouani's (from Arnaud) vs. Chi\_RegQbz = on'' vs. Chi\_RegQbz = off''

As you see, the threshold of the Red line (20x20x20 Chi\_RegQbz=on) and Alouani's are almost the same, but the red line is too oscillating at the low energy part.

On the other hand, ``Chi\_RegQbz = off'' in Green broken line is not so satisfactory at the low energy part.

fig003

- Old unpublished result for spin wave of ZB MnAs in QSGW as

zbmnas

<!--

---

- OLD document before 2025-5-7

誘電関数  $q = 0$  を計算するには、最近のバージョンの (2023-10-23 以後) の収束したところからスクリプト epsPP0 を使ってください。

ecalj/MATERIALS/Cueps

にサンプルがあるので、Cu を収束させた後、

epsPP0 cu -np 4

などとすると、epsinter.glt, epsintra.glt, epsall.glt

ができます。epsintra はフェルミ面の寄与になります。

いくつかの q 点で計算して  $q \rightarrow 0$  を取るのです。そのために ctrl には

-----  
QforEPSunit on

0d0 0d0 0.00001

0d0 0d0 0.001

0d0 0d0 0.0014142

0d0 0d0 0.002

0d0 0d0 0.0028284

0d0 0d0 0.004

-----  
などを書いておく必要があります。

最低でも、2行入ります。

QforEPSunita on

0d0 0d0 0.00001

0d0 0d0 0.001

-----  
が、いります.できれば後何行かあったほうがいいです。

QforEPSunita onは単位を2pi/alat とする指定です。

最初の行の0d0 0d0 0.00001 は数値誤差を計算するためにいるんです。

0d0 0d0 0.001での誘電関数計算にも 0d0 0d0 0.00001で計算した行列要素（誤差の大きさを計算）を使  
うんです。なので、EPS0002以後が意味のある答えになります。

epsinter.gltなどではqを複数計算して重ねてみてください。

Cuだとキレイにかさなっているのが見て取れます。

epsPP0では最後にreadeps.pyを読んでて答えをまとめ上げてます。

（readeps.py汚いです。試行錯誤の結果が残っていて関数fd0はいまは使っていません）。

いぜんよりはだいぶとキレイに求まると思います。

Ag、結果がこれでも変なら教えてください。

=====  
-->