

前言

1. VO_2 相变如何发现
2. 发现 VO_2 的两种结构
3. DFT计算得到相变温度与实验相符
4. VO_2 材料有何特性，导致运算量上升，引出可使用+U的办法
5. +U有什么问题，U应该加多少，有什么限制
6. 本文采用什么相变计算方法，前人有谁做过，从相变能量角度应该考虑+U为多少

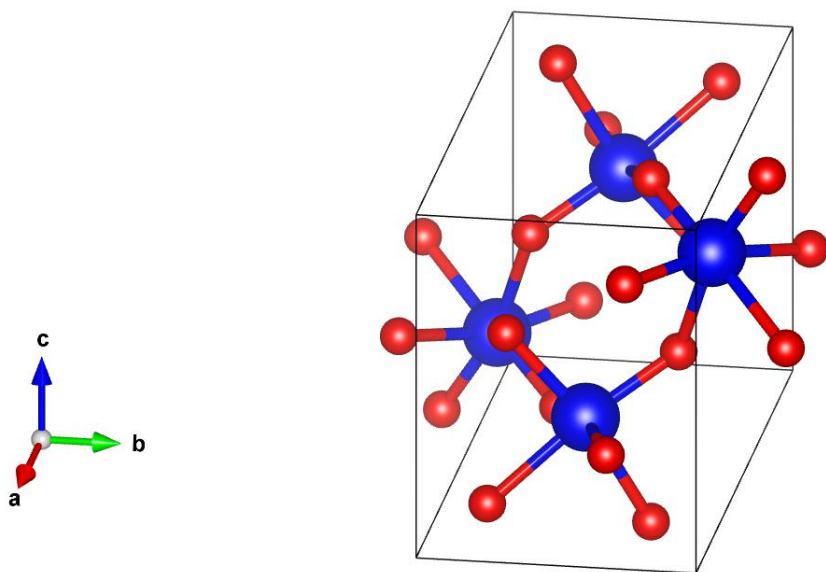
正文

结构

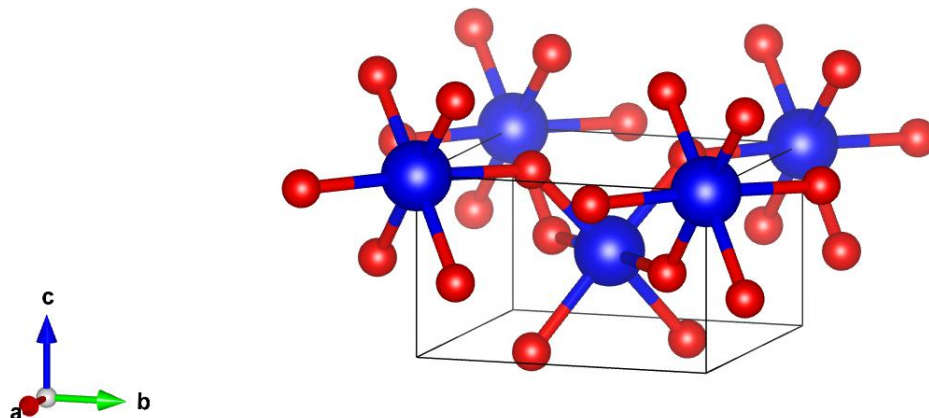
M结构(12原子)

本文使用jpg格式，latex中使用pdf格式

改颜色



R结构 (6原子)



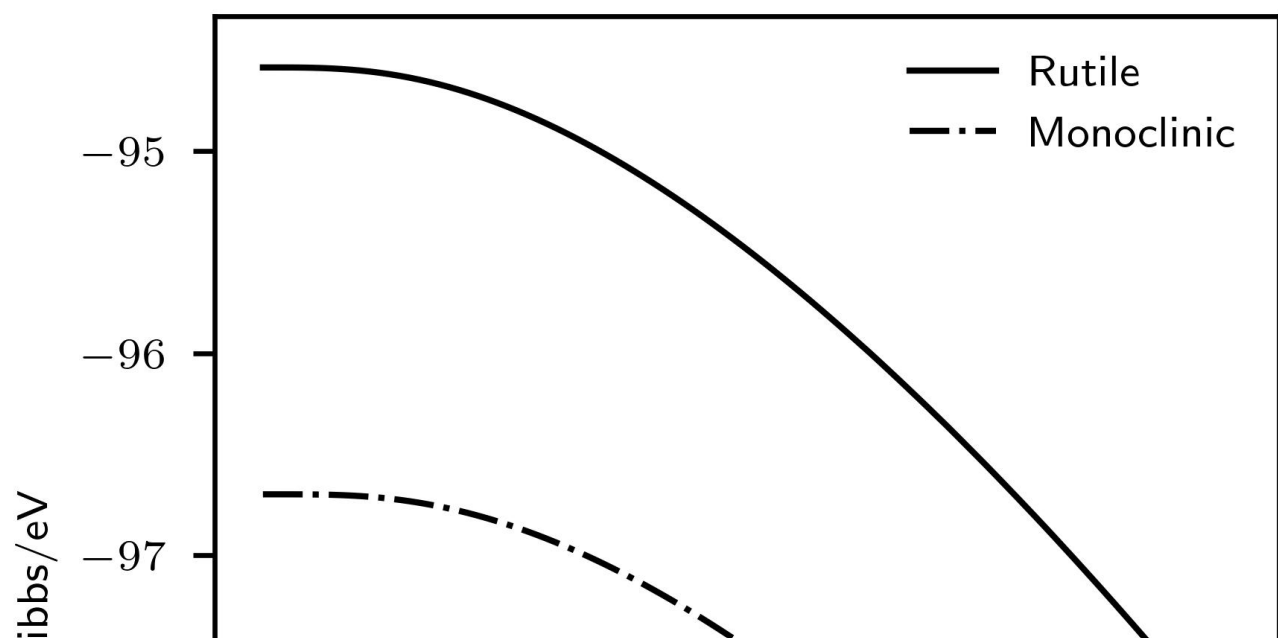
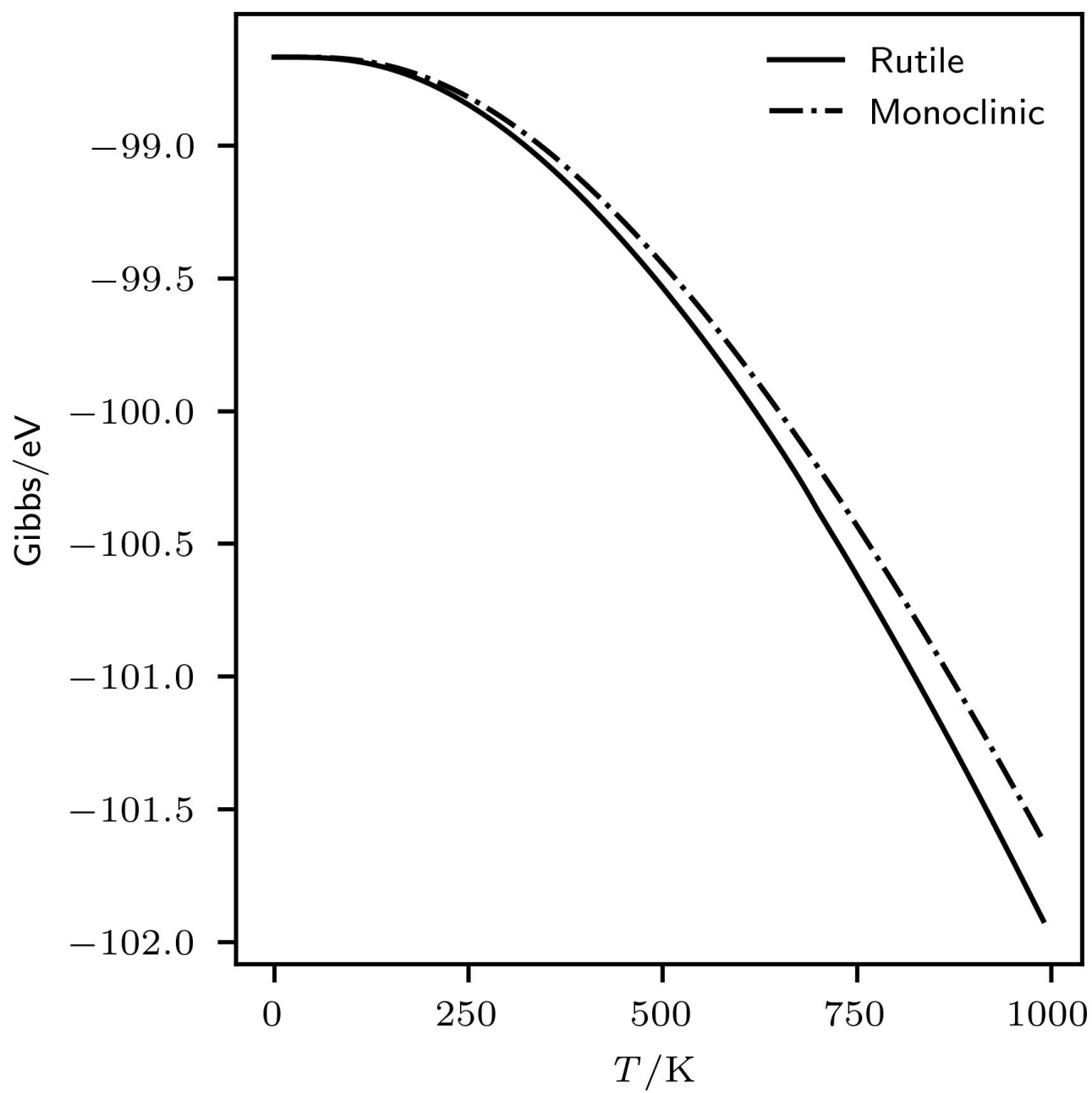
qha

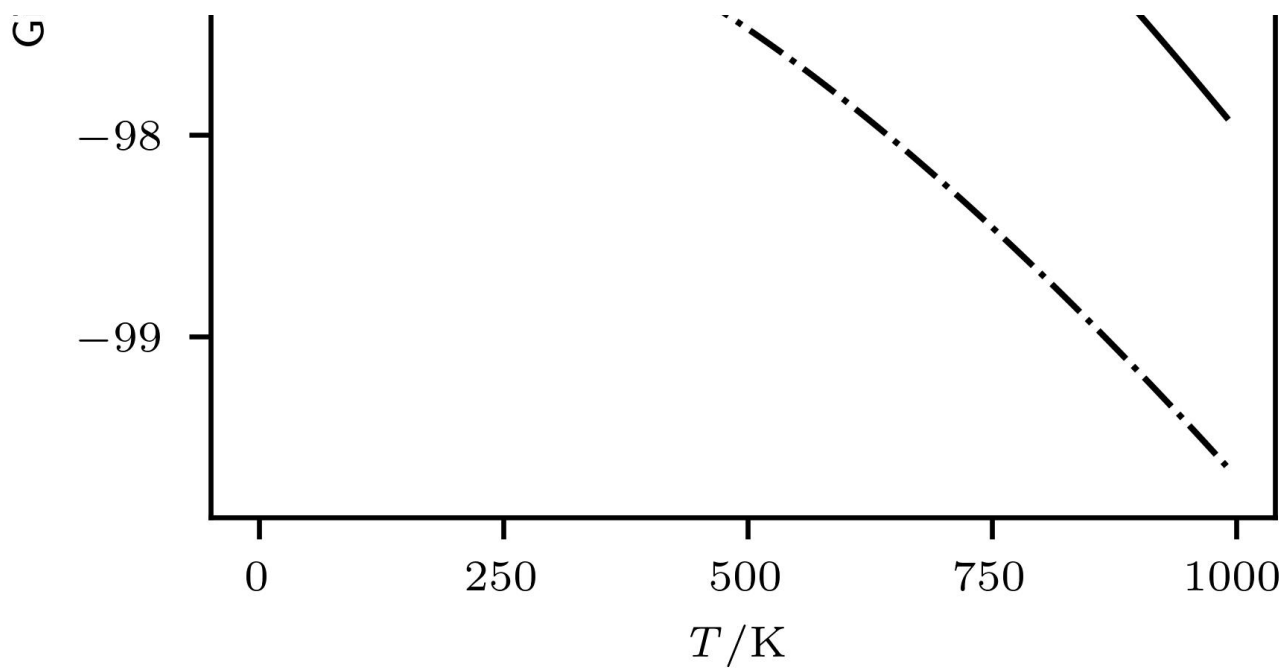
计算方法

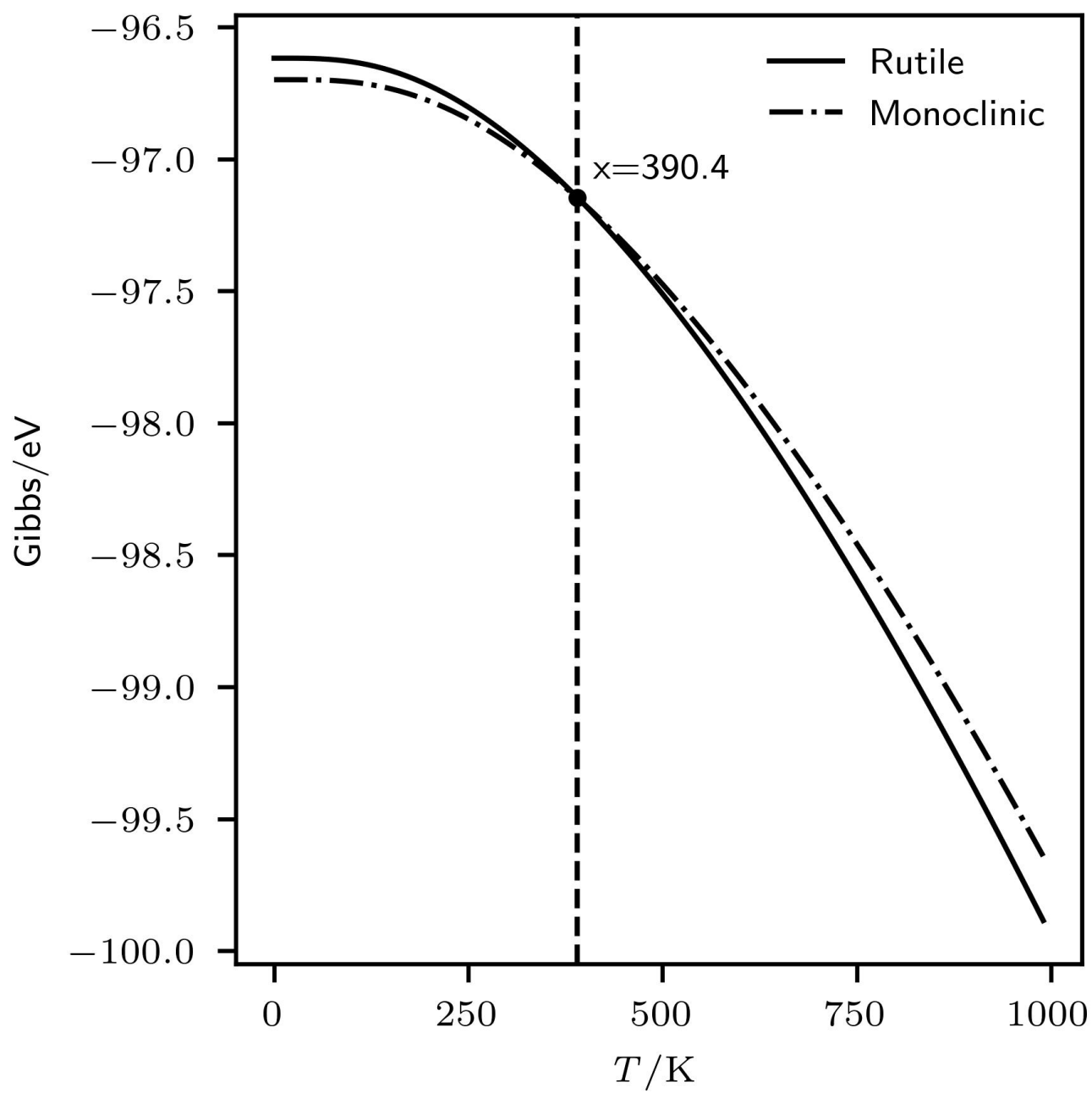
1. 将结构都变成12原子结构
2. 对两种结构加入三组U值分别为：1, 1.5, 2
3. 对每一种进行 `ISIF=3` 的弛豫，达到稳定状态
4. 将POSCAR中的factor分别设置为：0.980, 0.985, 0.990, 0.995, 1.005, 1.010, 1.015, 1.020, 进行 `ISIF=4` 的等体积弛豫，相当于在一定压强下优化
5. 使用更大的晶胞即221倍为超晶胞，计算声子谱，确定没有虚频后计算其热性质
6. 对其进行qha计算，得到0压力下Gibbs能量随着温度的变化
7. 两种结构，三组U值，分别考虑不同的处理方法（是否使用efe），共得到12组gibbs能量，将两种结构对应相同的U值和处理方法进行比较，可以知道在某一温度相交时即对应相变发生位置

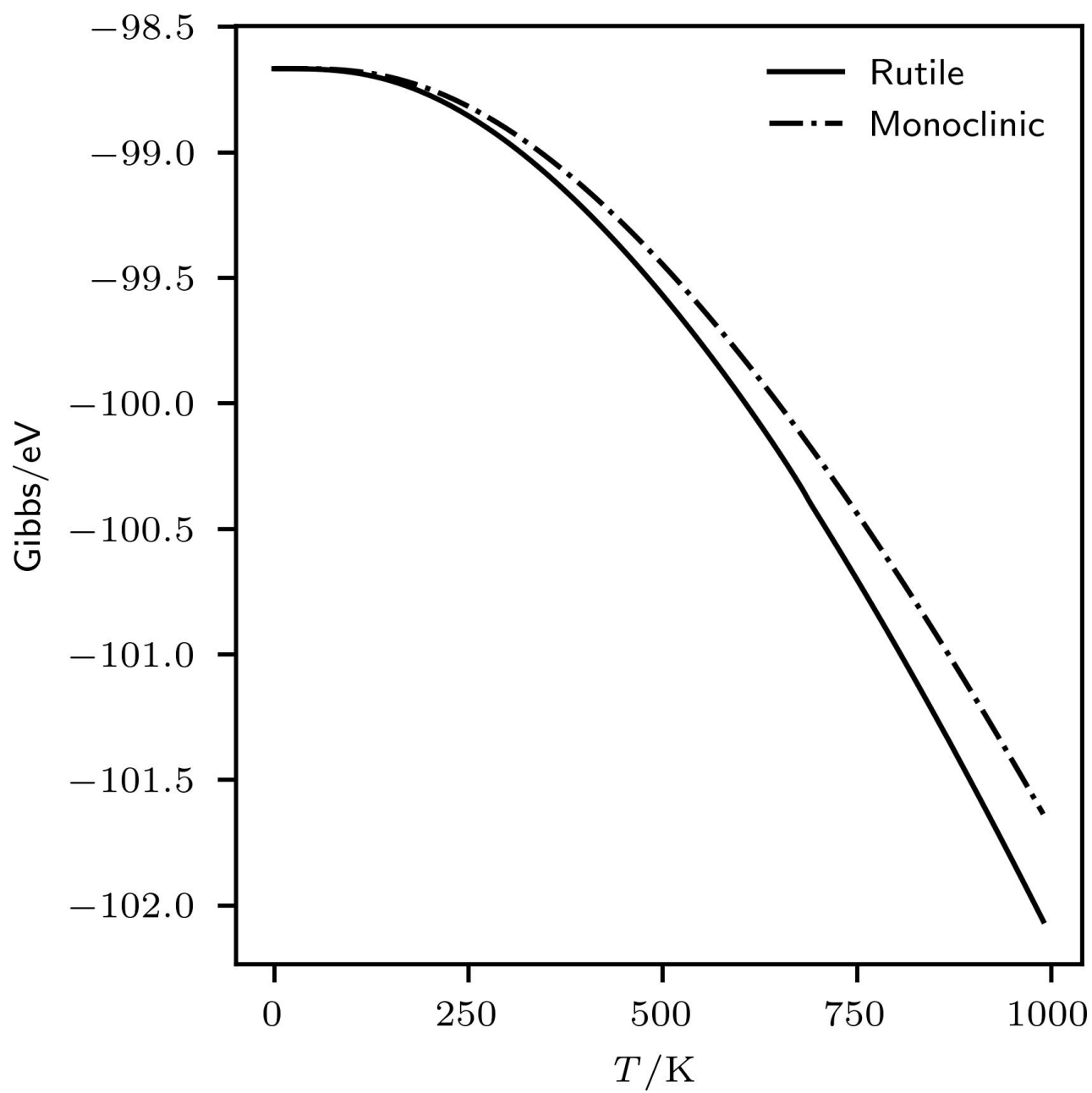
helmholtz-volume的图

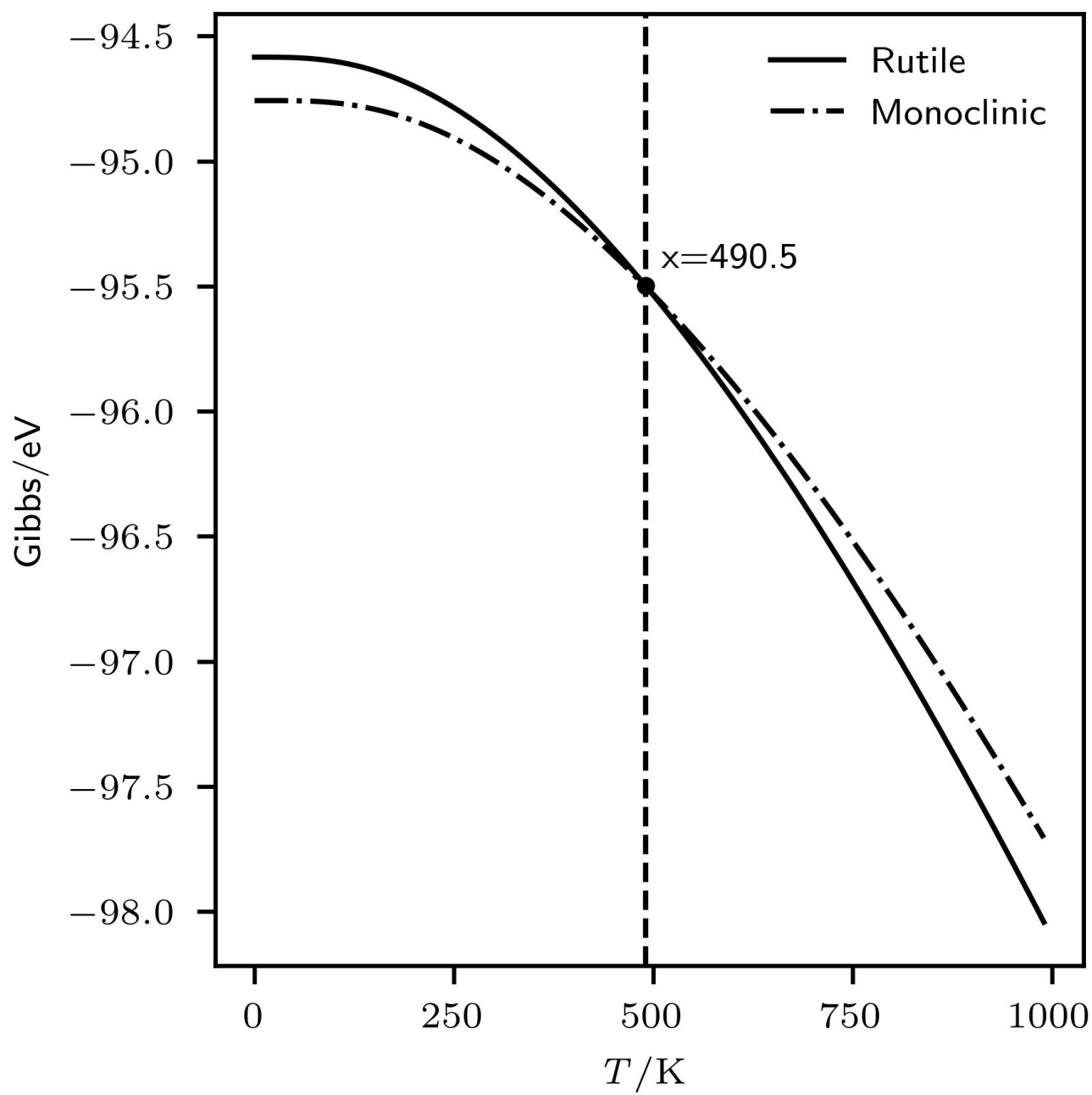
计算结果

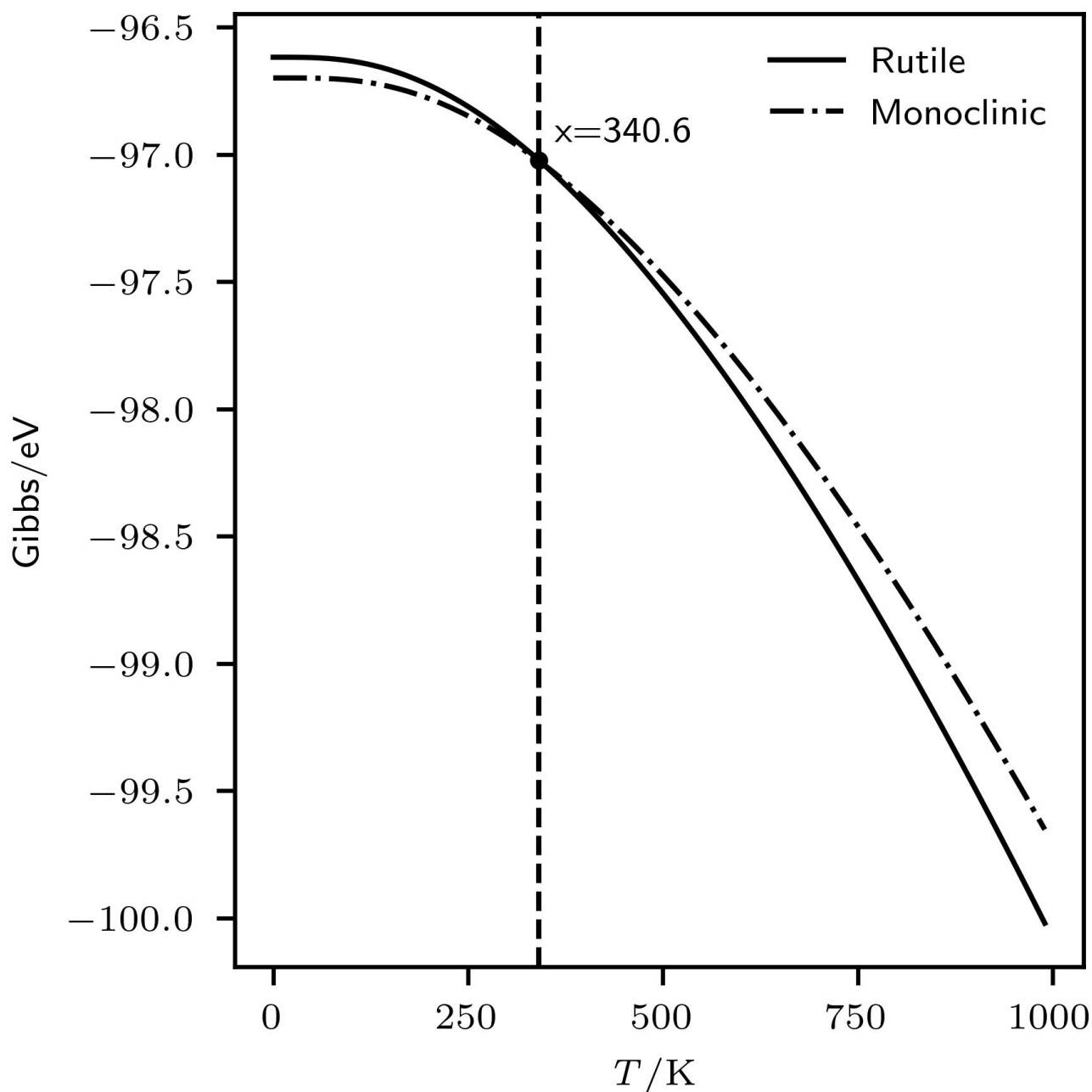












标题放在里面

增加一个小图

可以看到 $U=1$ 时交点过于靠前（甚至没有交点）， $U=2$ 时交点过于靠后，选取 $U=1.5$ 时使用efe恰好使得交点位于340K，即相变的温度。

U的范围

以上叙述了 U 在考虑相变时的取值，那么 U 必须满足什么条件呢？

参考文献

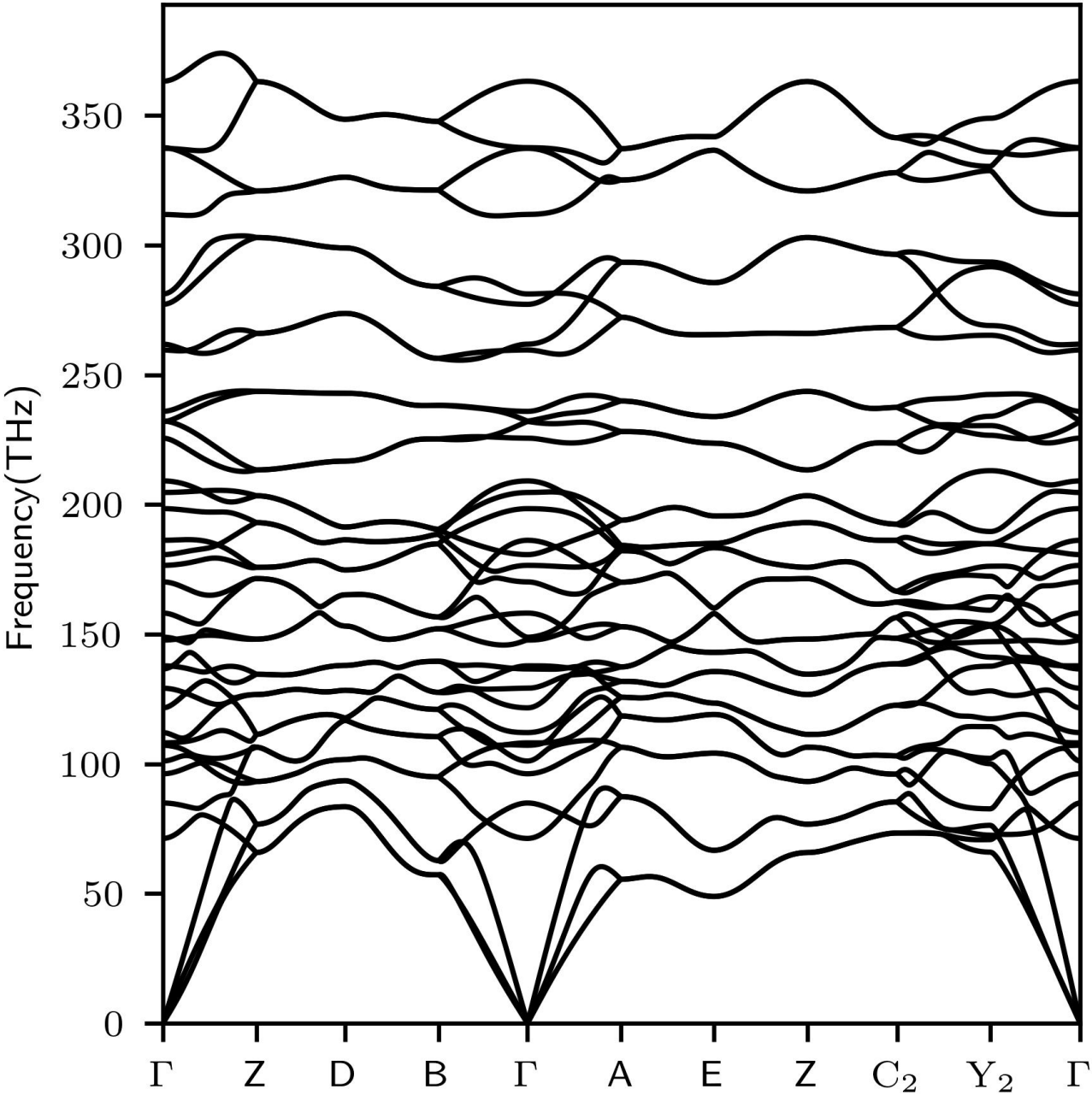
我们在此基础上进行了pbe+ U 的计算，得到不同的能带间隔：

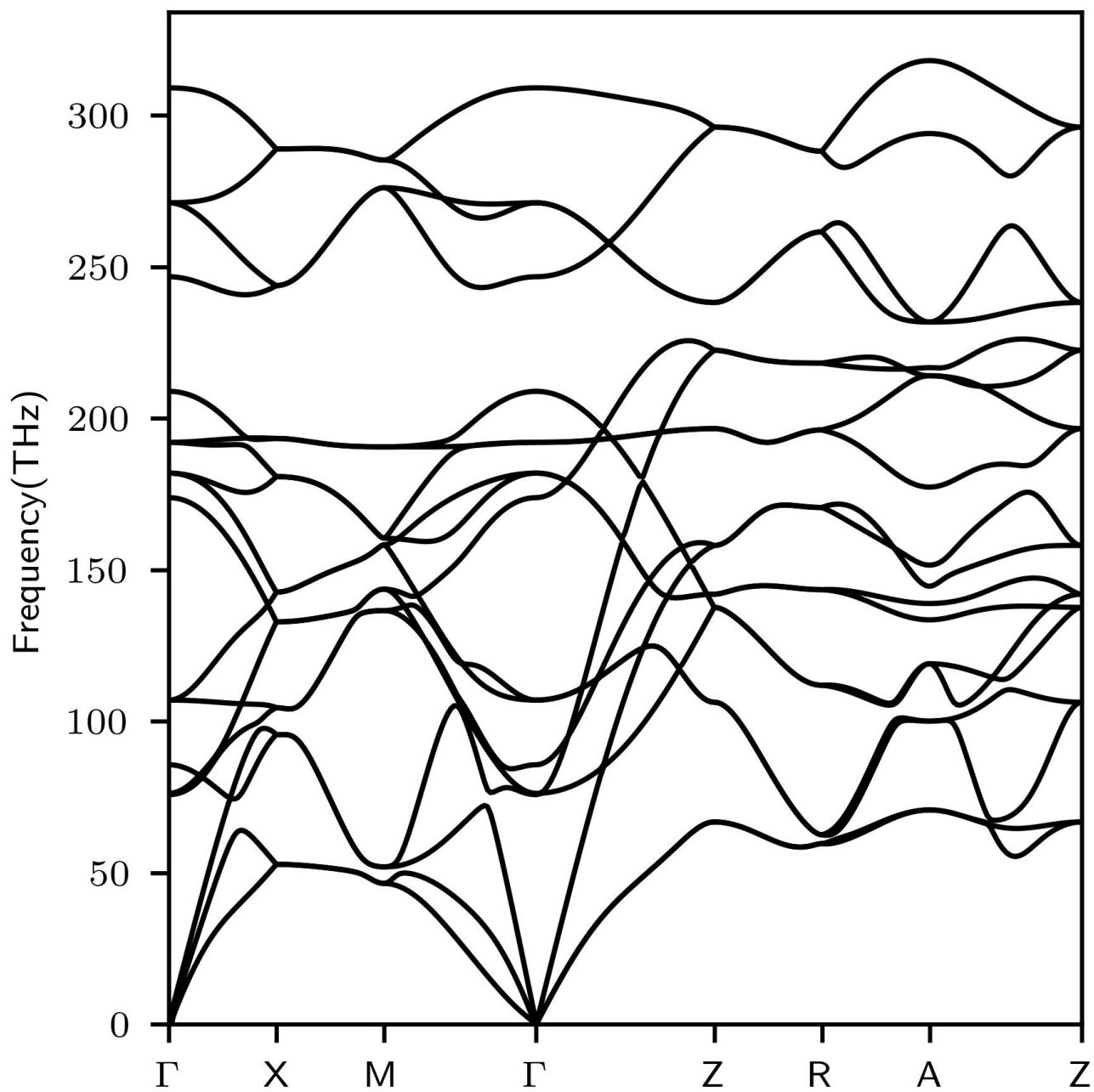
U	M	R
1	0.2138	-0.6206
2	0.4424	-0.6190
3	0.7073	-0.5795
4	0.9994	-0.3935

可以看到在增大U的时候，M不会从非金属变为金属，但是R却可能从金属变为非金属，所以U的大小有一定的限制

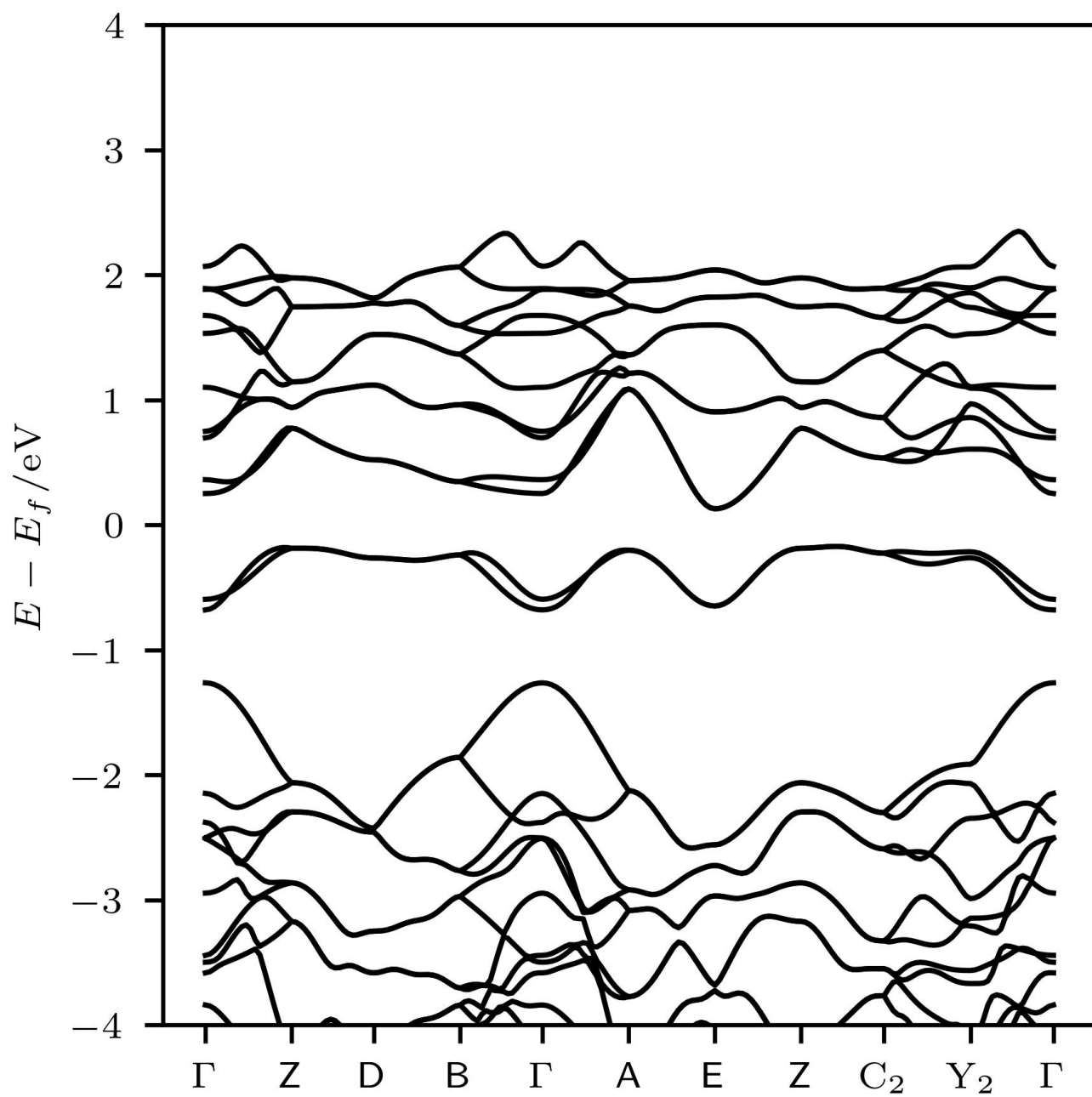
能带和声子谱

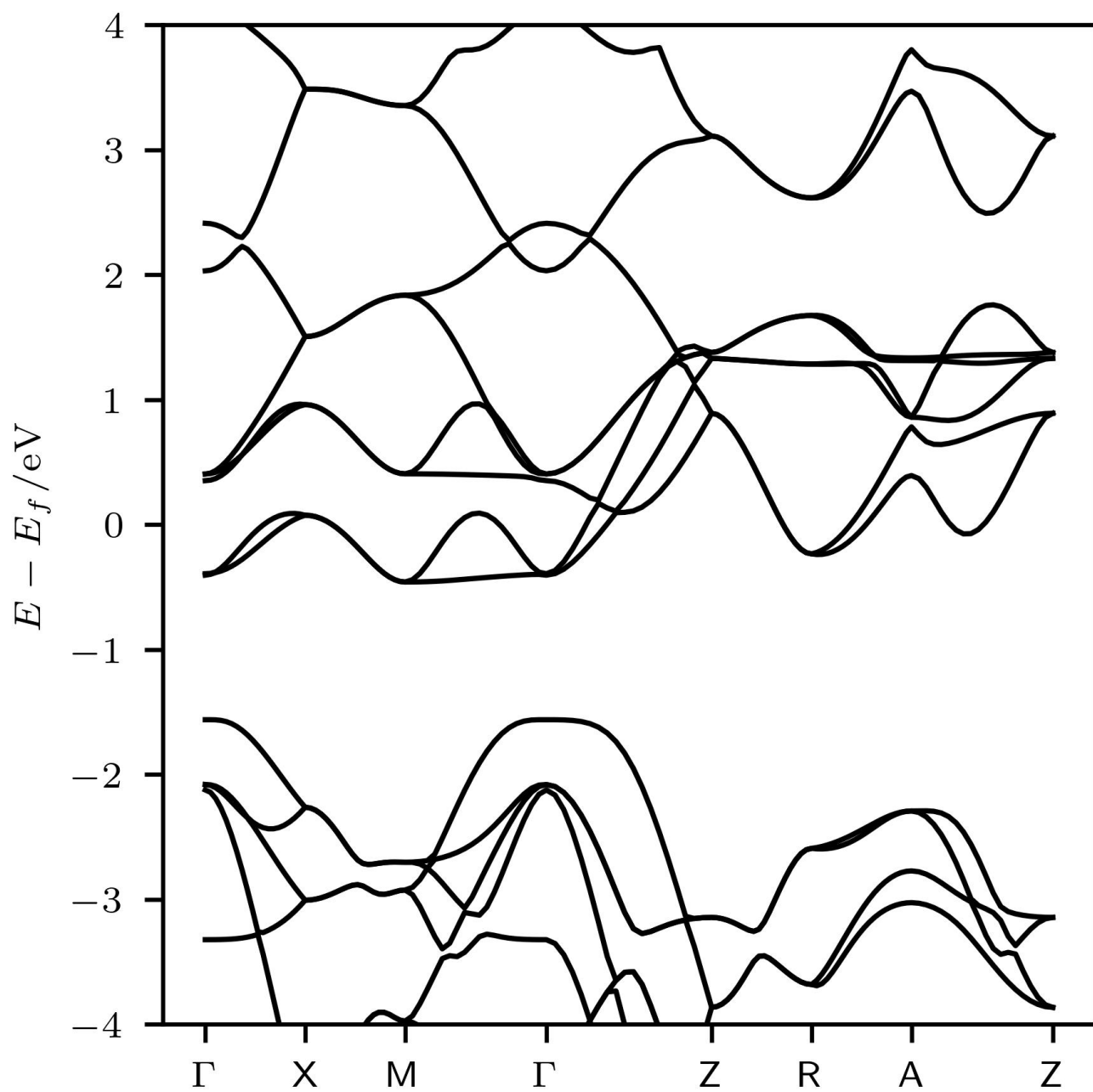
U=1.5





U=1.5





问题

1. 画的图线条以及坐标轴粗细，字体大小