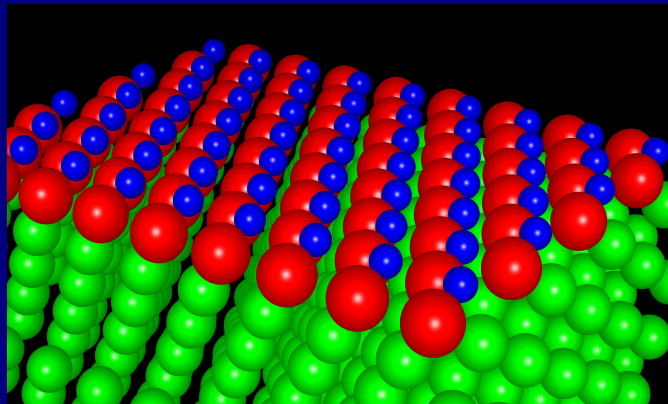




The Henryk Niewodniczański
Institute of Nuclear Physics
Polish Academy of Sciences



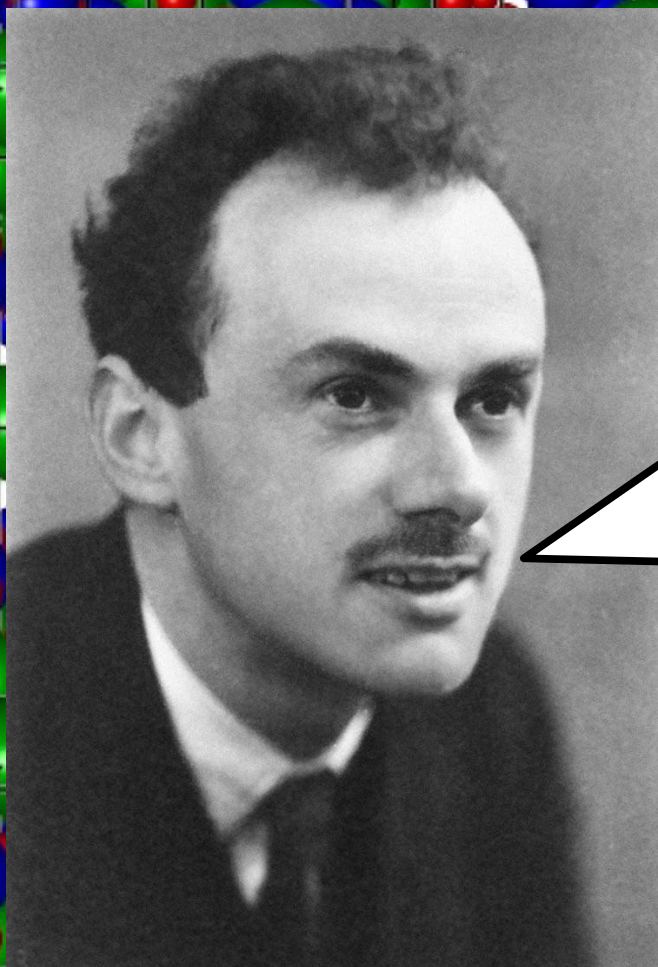
Podstawy obliczeń *ab initio*



Przemysław Piekarz

*Zakład Komputerowych Badań Materiałów
Instytut Fizyki Jądrowej PAN*

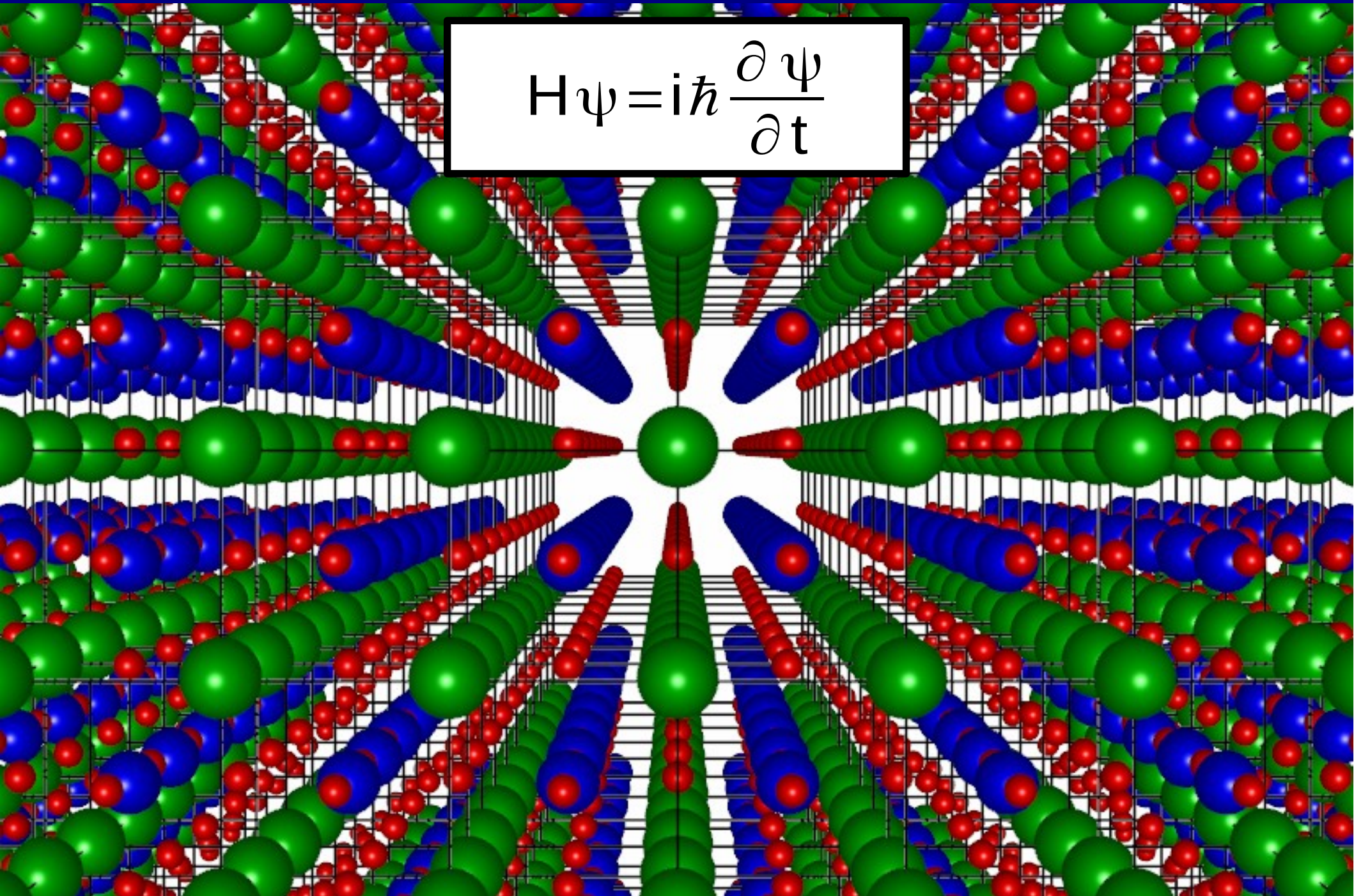
Metody obliczeniowe *ab initio*



Podstawowe prawa fizyki konieczne do teoretycznego opisu dużej części fizyki i całej chemii są już kompletnie znane i jedyną trudnością jest to, że dokładne zastosowanie tych praw prowadzi do równań, które są zbyt skomplikowane, żeby je rozwiązać. Zatem pożądanym jest rozwinięcie przybliżonych praktycznych metod zastosowania mechaniki kwantowej, które umożliwią wyjaśnienie głównych własności złożonych układów atomowych bez wielkich obliczeń (1929).

Metody obliczeniowe *ab initio*

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$



Metody obliczeniowe *ab initio*

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \sum_j \frac{\hbar^2 \nabla_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

Metody obliczeniowe *ab initio*

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \sum_j \frac{\hbar^2 \nabla_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

Teoria funkcjonału gęstości (DFT)

Twierdzenia Hohenberga-Kohna

$$E[n(\vec{r})] = E_K[n(\vec{r})] + E_{\text{ext}}[n(\vec{r})] + E_H[n(\vec{r})] + E_{\text{xc}}[n(\vec{r})] = \min$$

Metody obliczeniowe *ab initio*

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \sum_j \frac{\hbar^2 \nabla_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

Teoria funkcjonału gęstości (DFT)

Twierdzenia Hohenberga-Kohna

$$E[n(\vec{r})] = E_K[n(\vec{r})] + E_{\text{ext}}[n(\vec{r})] + E_H[n(\vec{r})] + E_{\text{xc}}[n(\vec{r})] = \min$$



LDA
GGA

Metody obliczeniowe *ab initio*

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \sum_j \frac{\hbar^2 \nabla_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

Teoria funkcjonału gęstości (DFT)

Twierdzenia Hohenberga-Kohna

$$E[n(\vec{r})] = E_K[n(\vec{r})] + E_{\text{ext}}[n(\vec{r})] + E_H[n(\vec{r})] + E_{\text{xc}}[n(\vec{r})] = \min$$

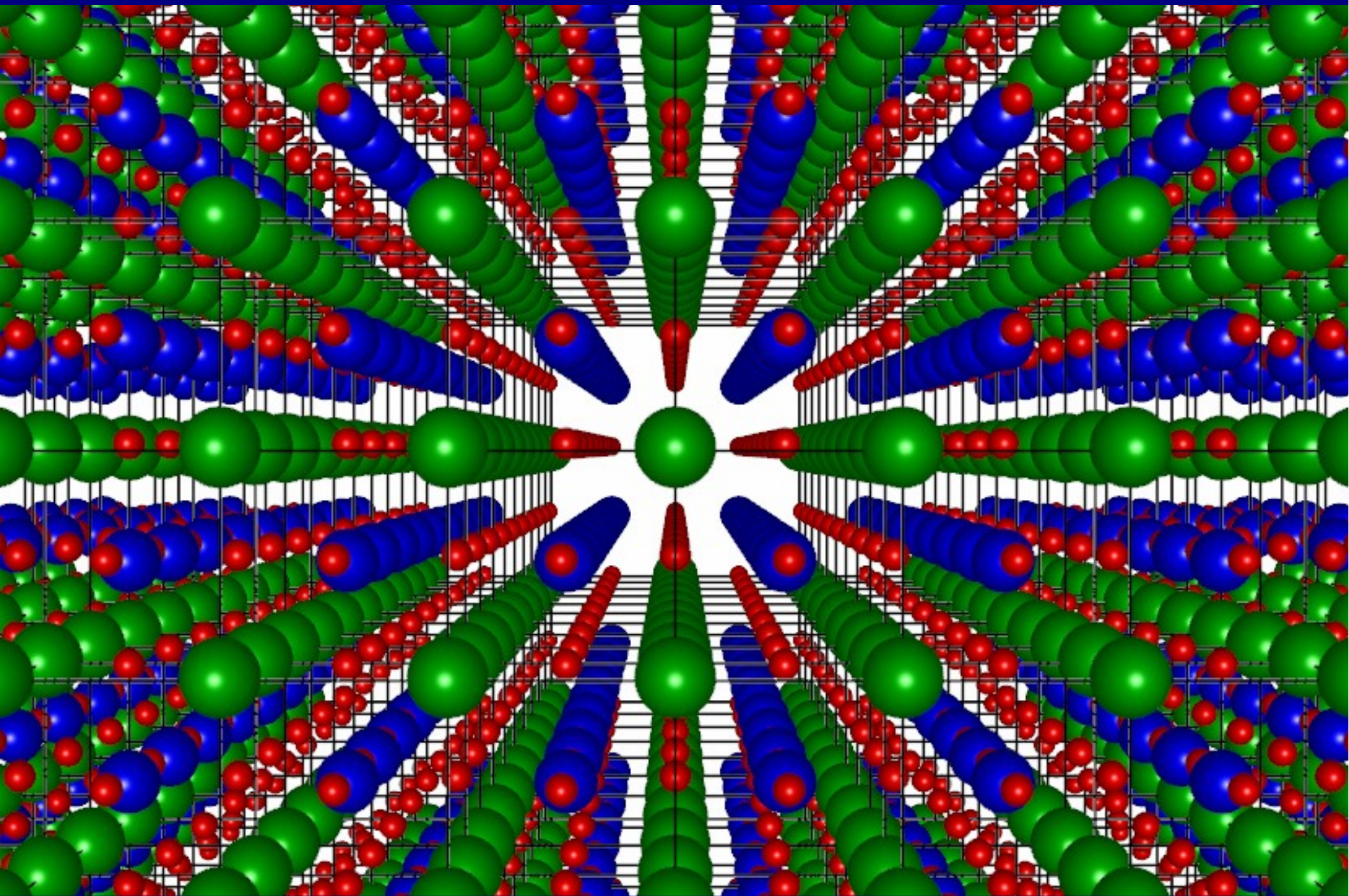


Równanie Kohna-Schama

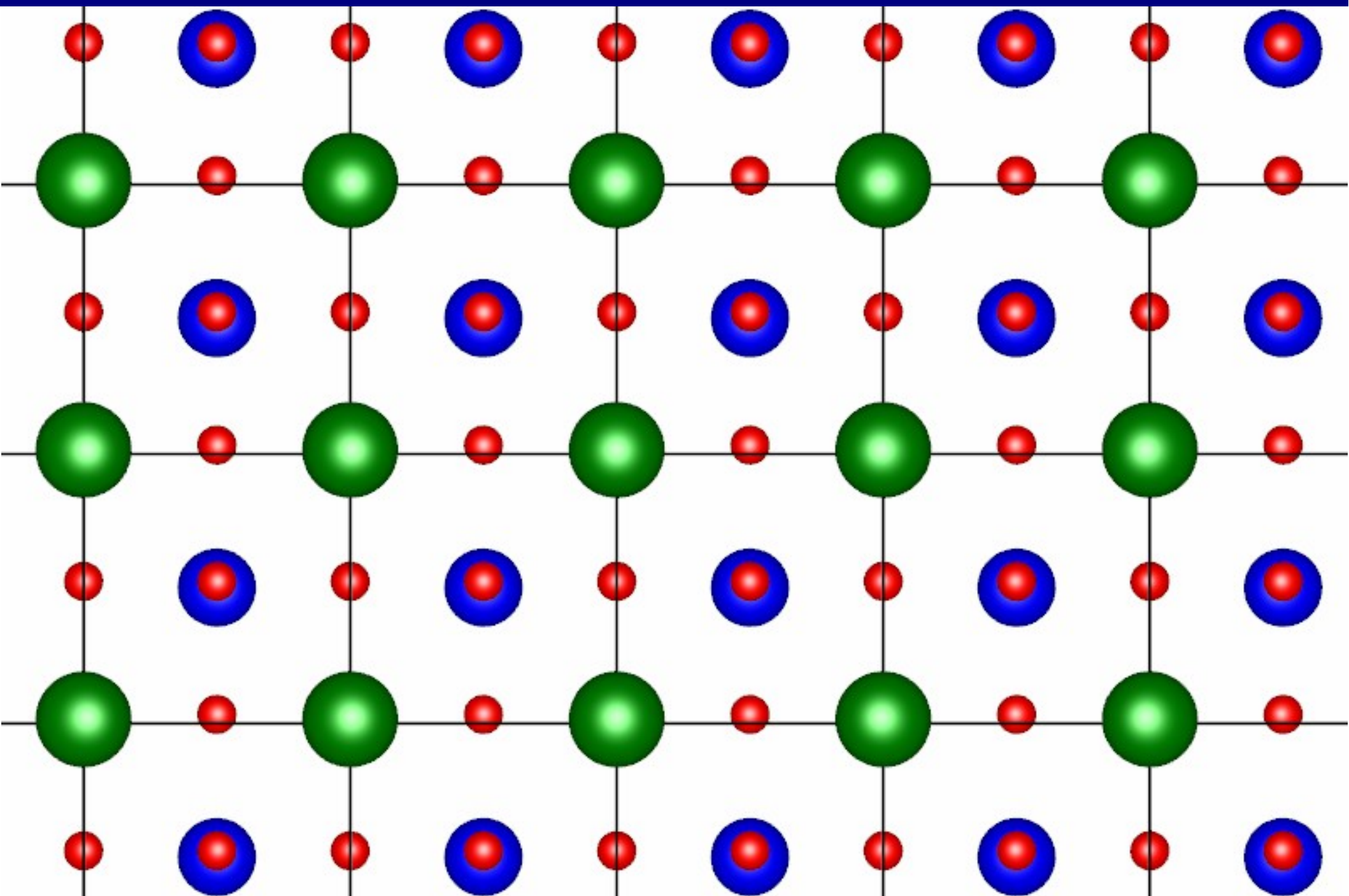
$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{KS}}\right) \psi_i = \epsilon_i \psi_i$$

LDA
GGA

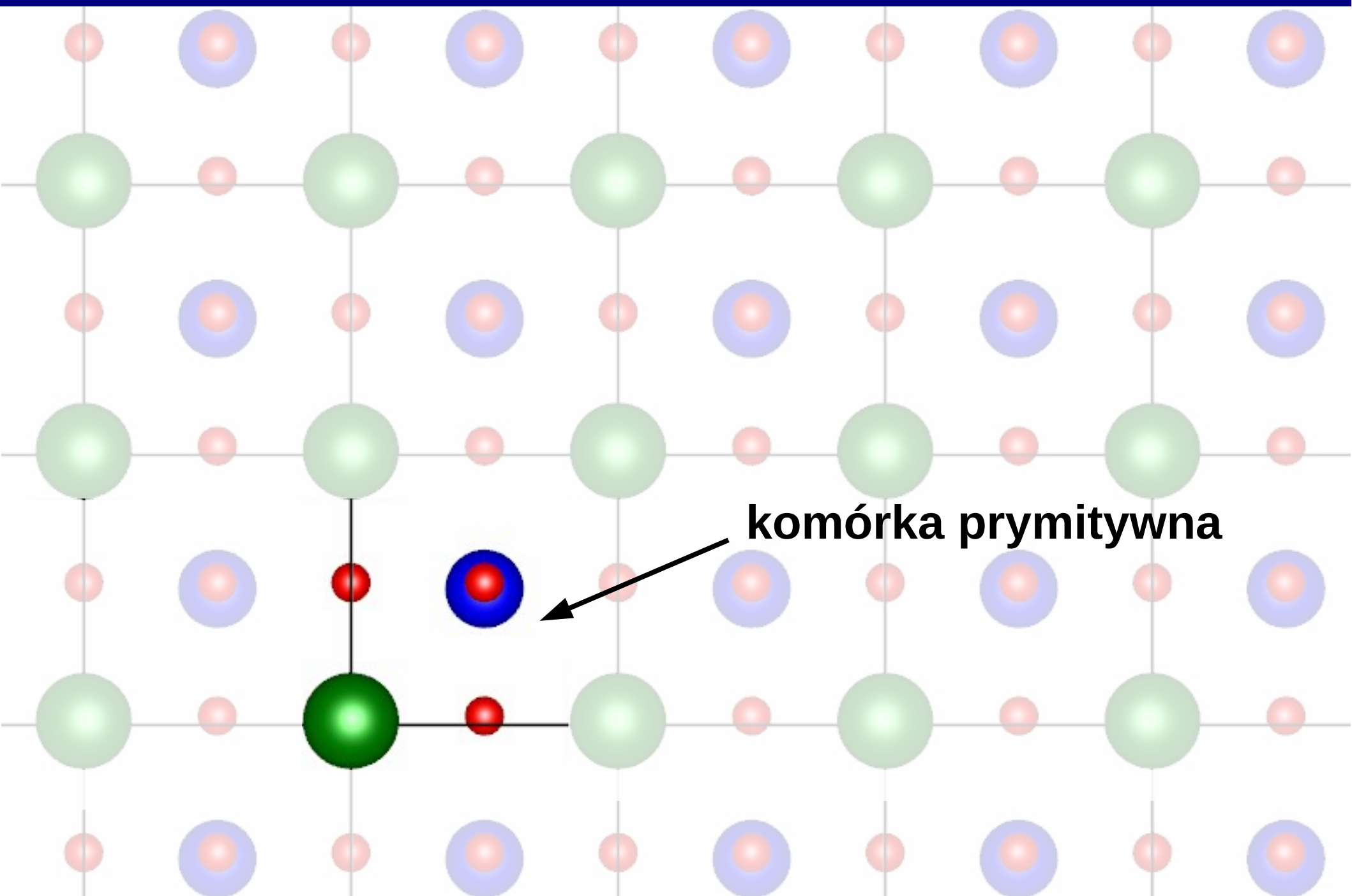
BaTiO₃



BaTiO₃



BaTiO₃

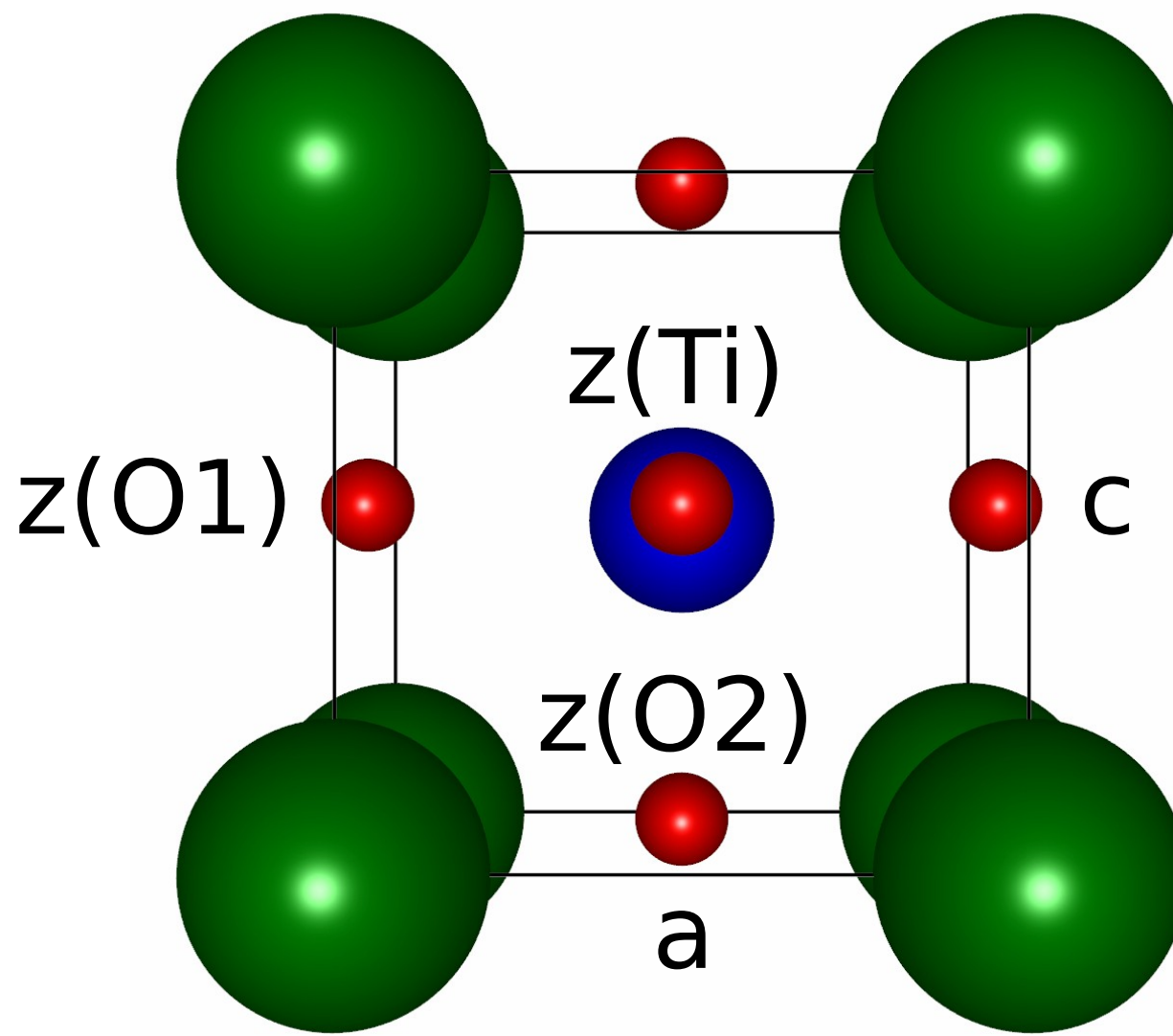


BaTiO₃

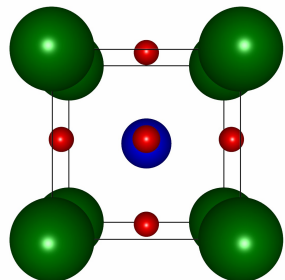
superkomórka 2 x 2 x 2



BaTiO₃



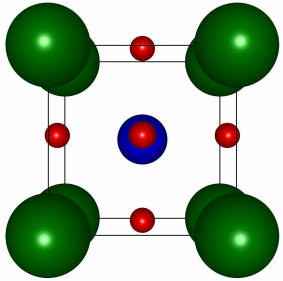
Optymalizacja struktury w DFT



Parametry startowe (p_i):
 $a, c, z(\text{O1}), z(\text{O2}), z(\text{Ti})$

Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT

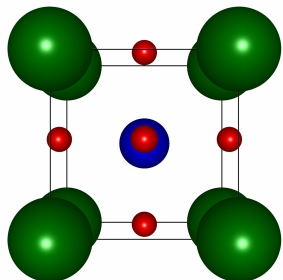


Parametry startowe (p_i):
 $a, c, z(\text{O1}), z(\text{O2}), z(\text{Ti})$

$$n_0(\vec{r})$$

Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT



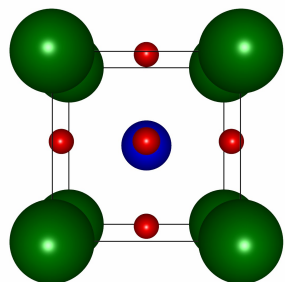
Parametry startowe (p_i):
 $a, c, z(\text{O1}), z(\text{O2}), z(\text{Ti})$

$$n_0(\vec{r})$$

$$V_{\text{KS}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{H}}(n) + V_{\text{xc}}(n)$$

Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT



Parametry startowe (p_i):
 $a, c, z(\text{O1}), z(\text{O2}), z(\text{Ti})$

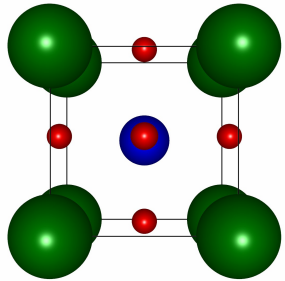
$$n_0(\vec{r})$$

$$V_{\text{KS}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{H}}(n) + V_{\text{xc}}(n)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{KS}}(\vec{r})\right) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT



Parametry startowe (p_i):
 $a, c, z(\text{O1}), z(\text{O2}), z(\text{Ti})$

$$n_0(\vec{r})$$

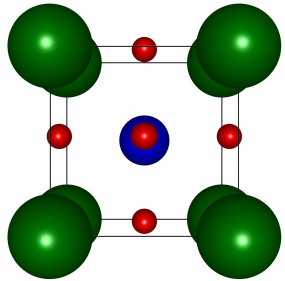
$$V_{\text{KS}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{H}}(n) + V_{\text{xc}}(n)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{KS}}(\vec{r})\right) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2$$

Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT



Parametry startowe (p_i):
 $a, c, z(\text{O1}), z(\text{O2}), z(\text{Ti})$

$$n_0(\vec{r})$$

$$V_{\text{KS}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_{\text{H}}(n) + V_{\text{xc}}(n)$$

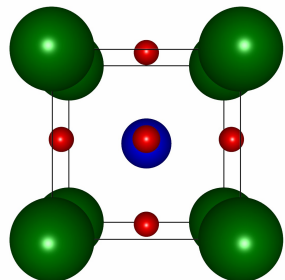
$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{KS}}(\vec{r})\right) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2$$

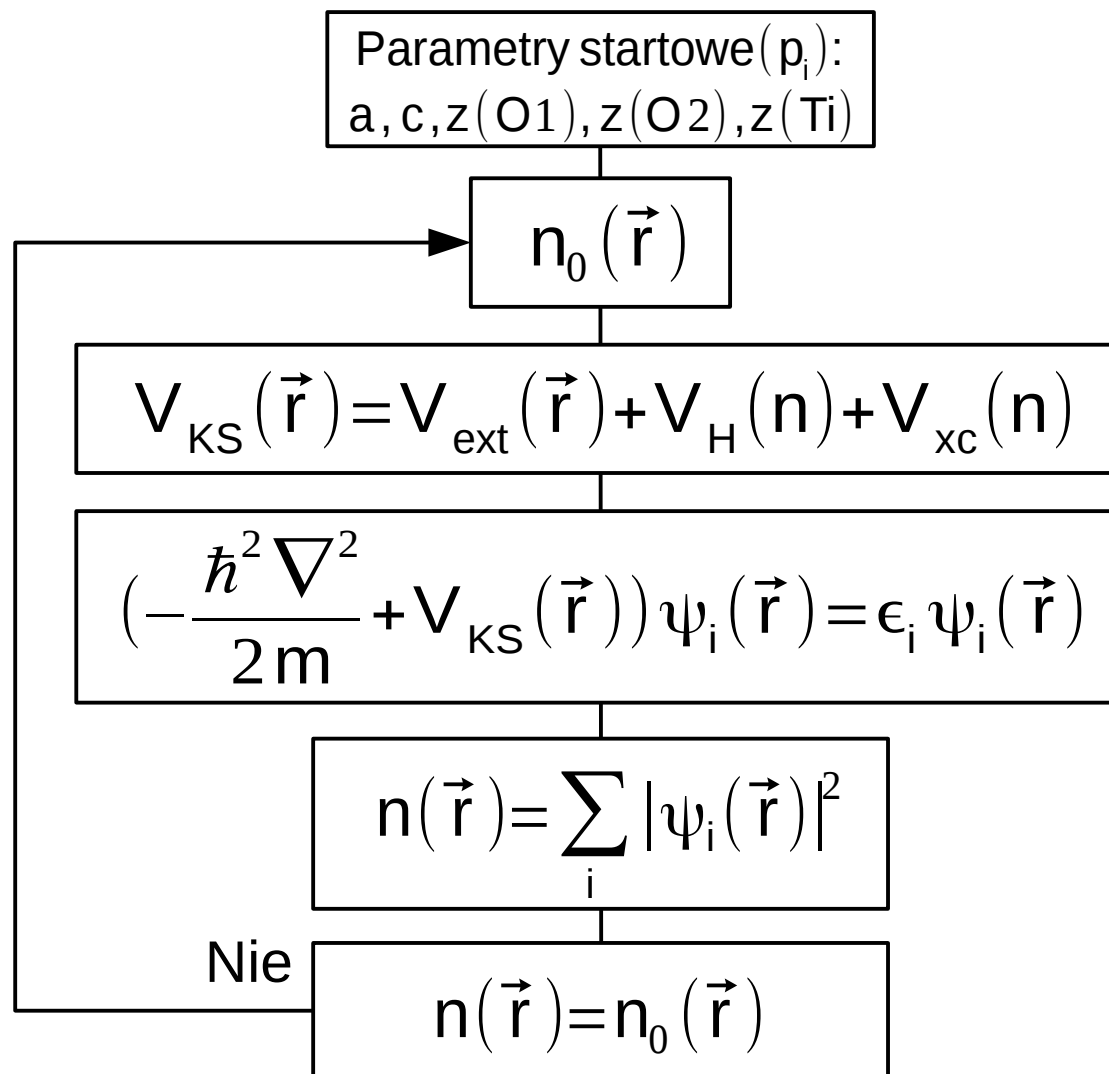
$$n(\vec{r}) = n_0(\vec{r})$$

Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT

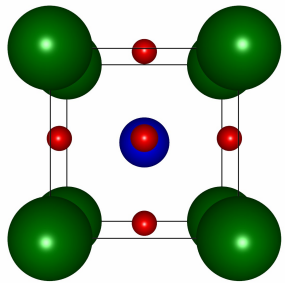


pętla
elektronowa

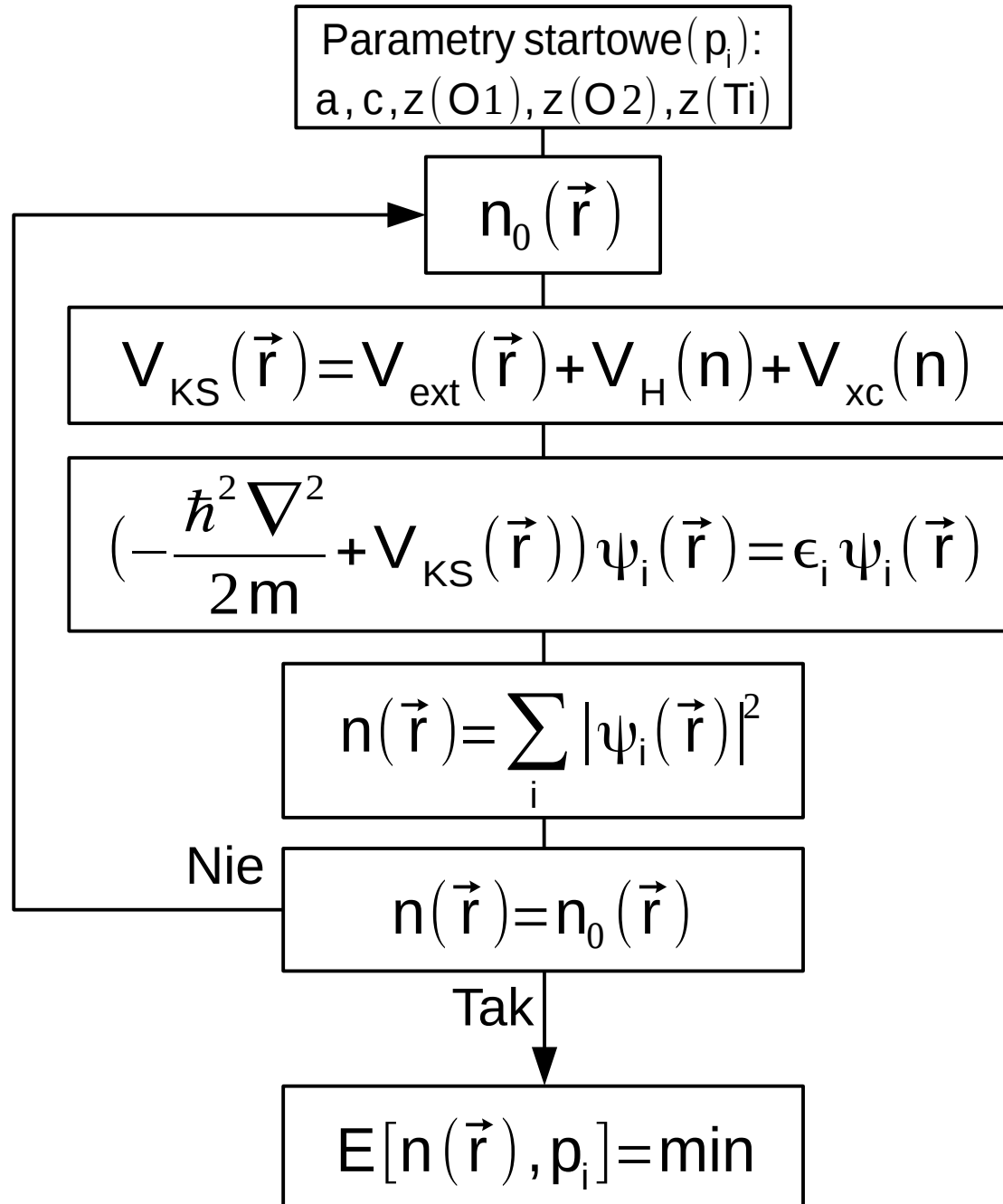


Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT

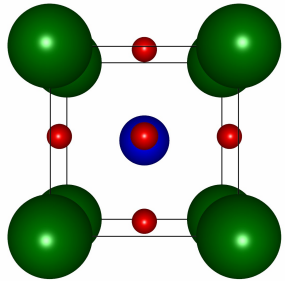


pętla
elektronowa

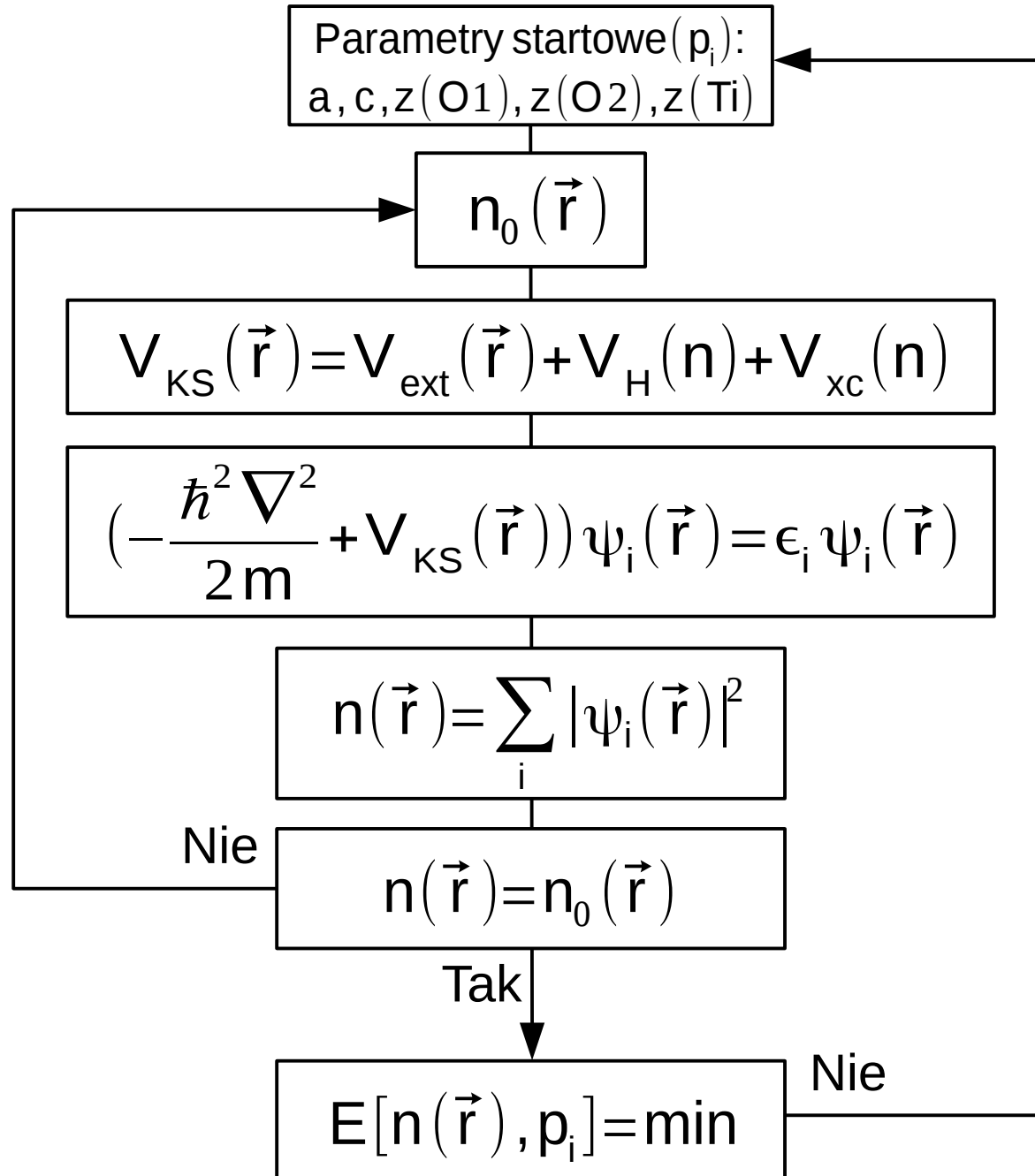


Software:
VASP
Wien2k
AbInit

Optymalizacja struktury w DFT



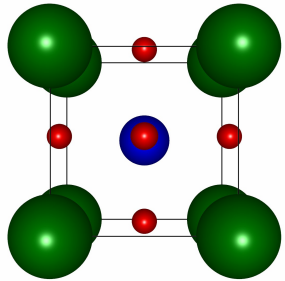
pętla
elektronowa



Software:
VASP
Wien2k
AbInit

pętla jonowa

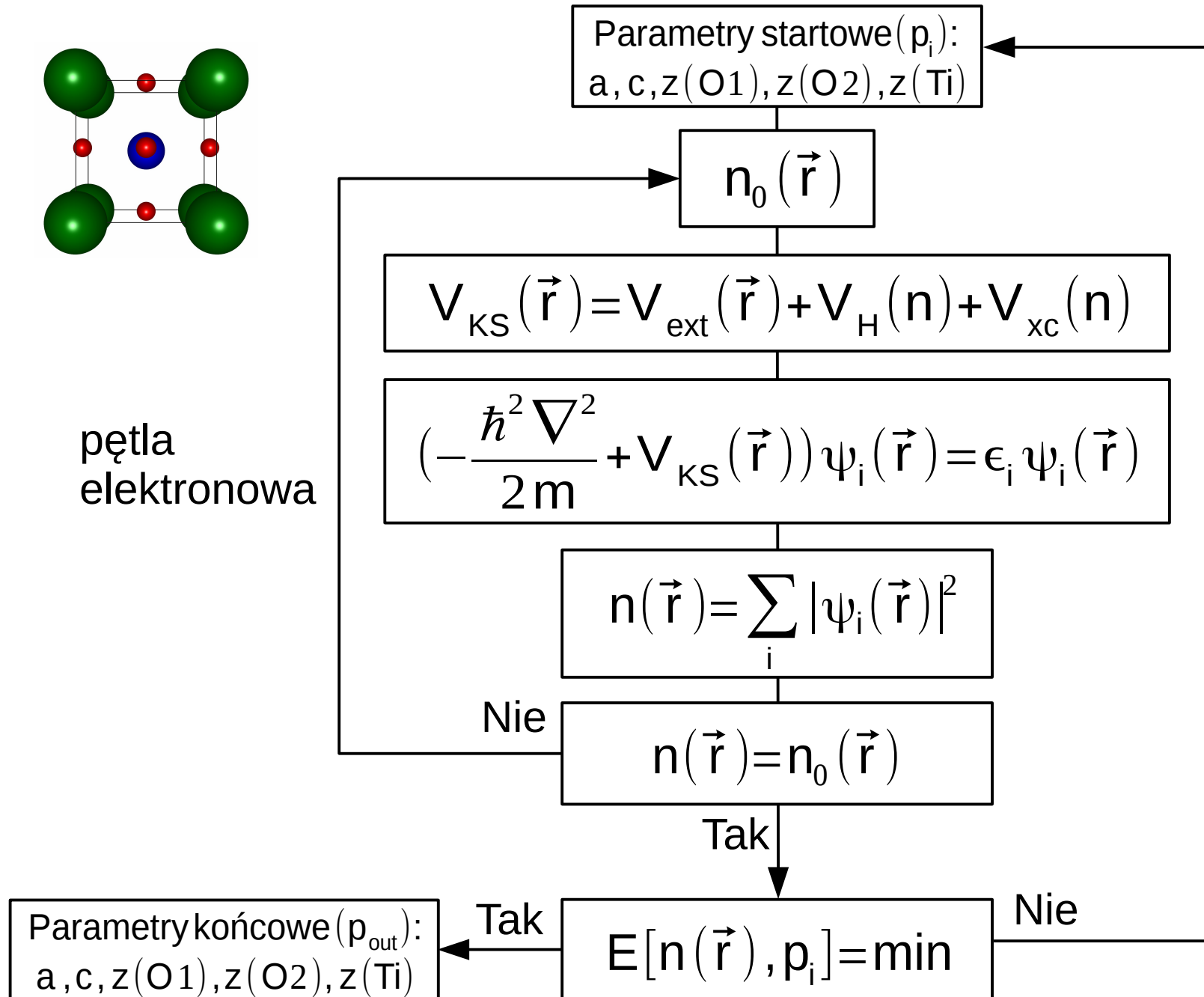
Optimalizacja struktury w DFT



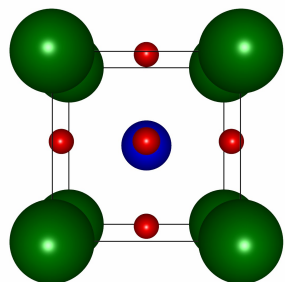
pętla
elektronowa

pętla jonowa

Software:
VASP
Wien2k
AbInit



BaTiO₃



	PBE	HSE	PBE0 [26]	PBE0 [27]	Exp. [25]
a (Å)	3.983	3.953	3.968	3.960	3.991
c (Å)	4.026	4.026	4.137	4.097	4.035
Δz_{Ti}	0.011	0.015	0.020	0.020	0.022
Δz_{O1}	-0.018	-0.027	-0.043	-0.039	-0.024
Δz_{O2}	-0.012	-0.016	-0.023	-0.020	-0.011

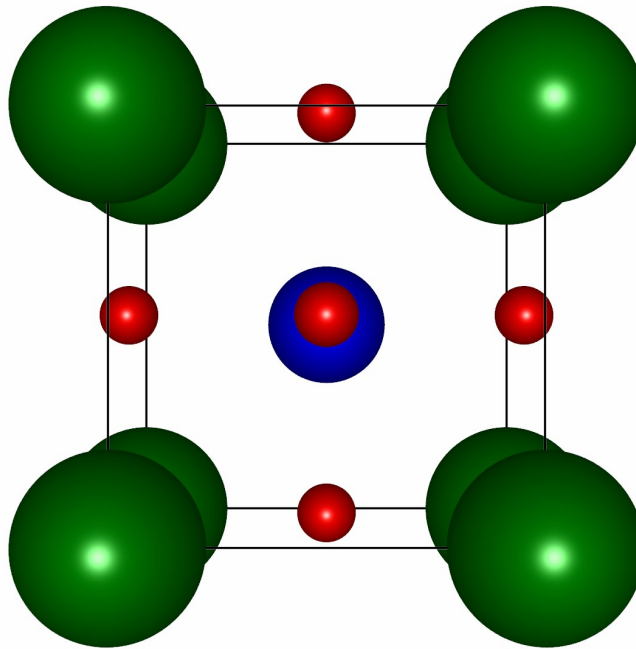
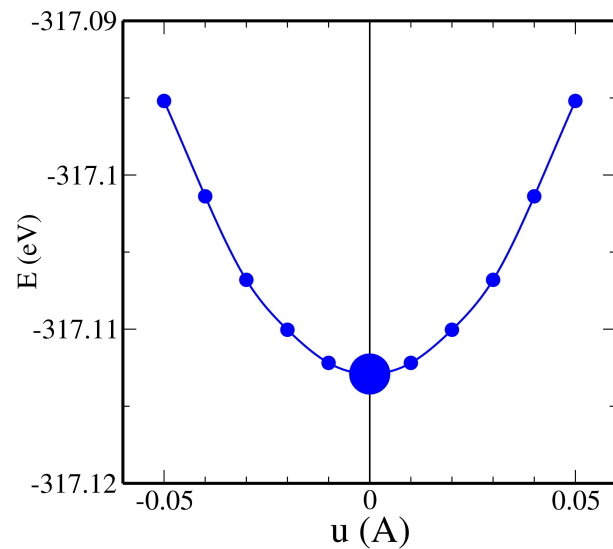
Siły Hellmanna-Feynmana

$$F = - \frac{\partial E}{\partial u}$$

Siły Hellmanna-Feynmana

$$F = -\frac{\partial E}{\partial u}$$

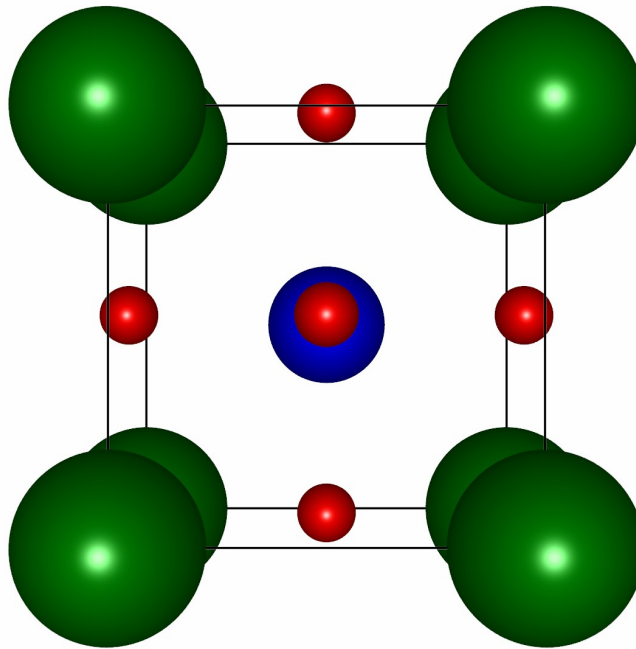
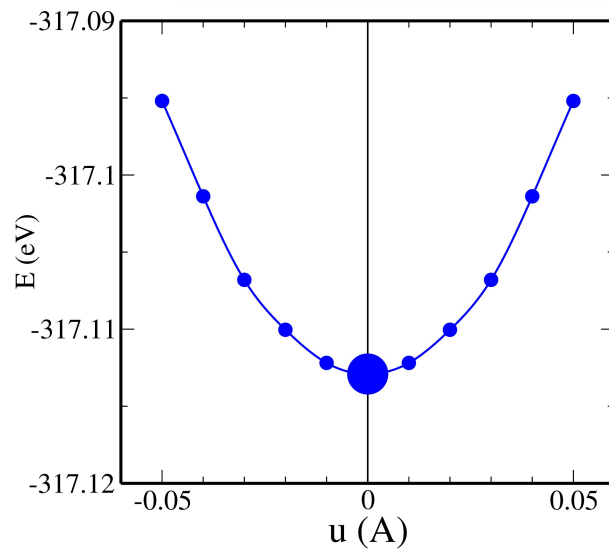
$$E = E_0 = \min$$



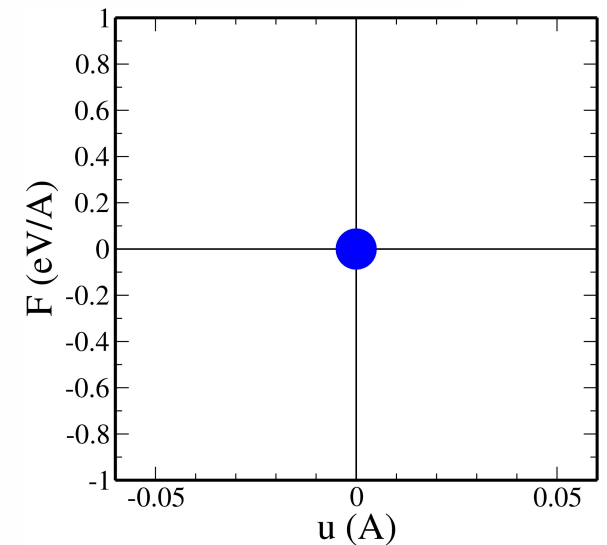
Siły Hellmanna-Feynmana

$$F = -\frac{\partial E}{\partial u}$$

$$E = E_0 = \min$$



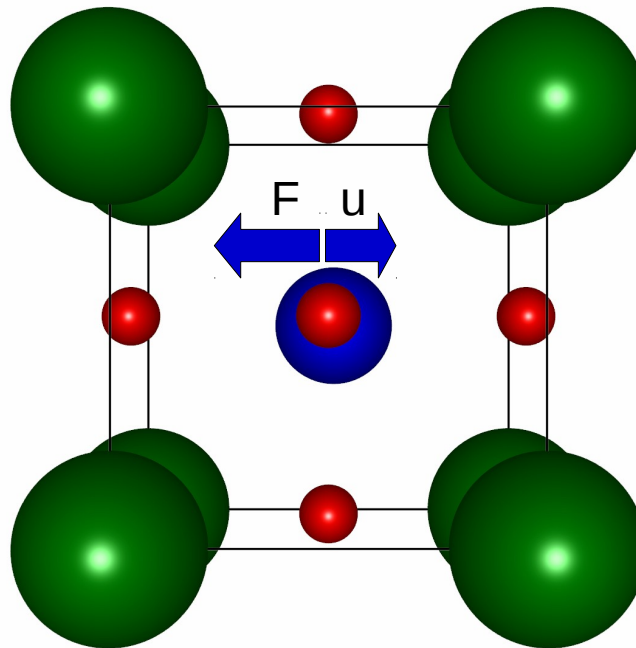
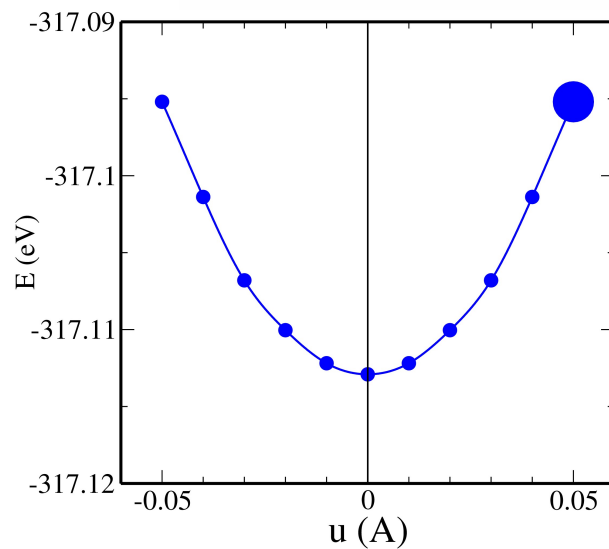
$$u = 0, F = 0$$



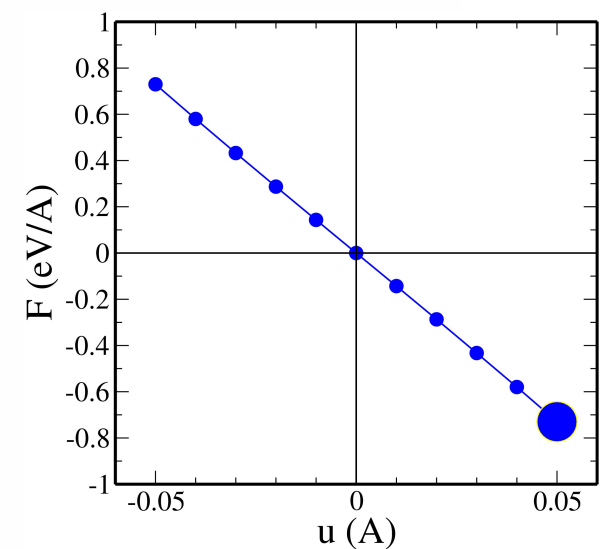
Siły Hellmanna-Feynmana

$$F = - \frac{\partial E}{\partial u}$$

$$E > E_0$$



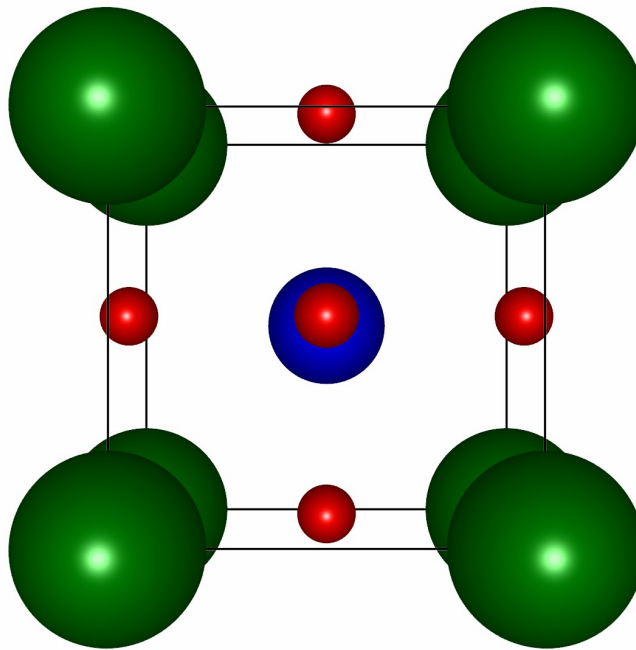
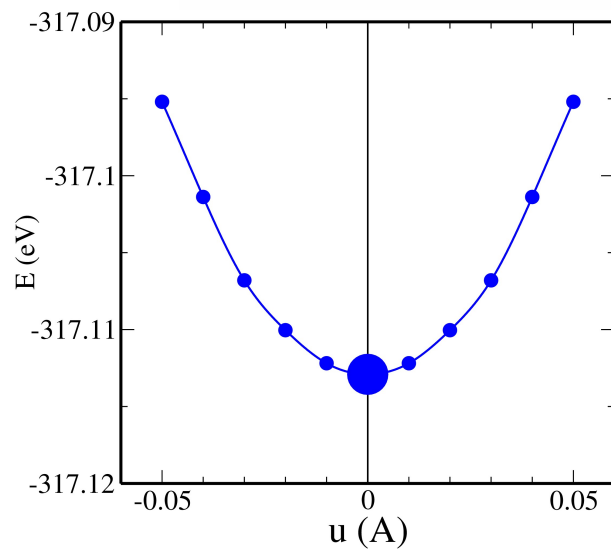
$$u > 0, F < 0$$



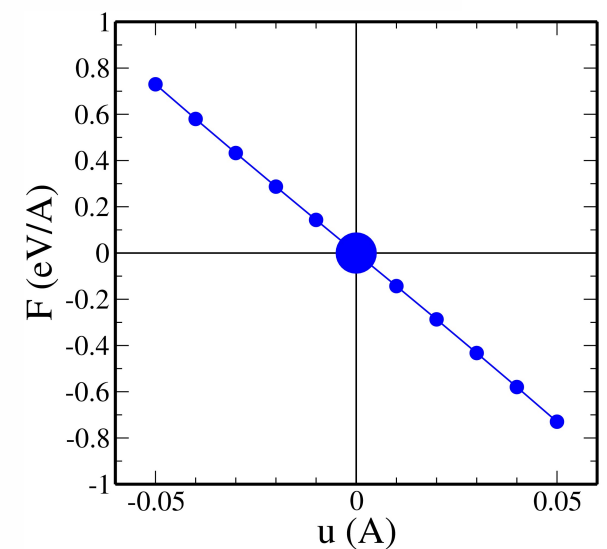
Siły Hellmanna-Feynmana

$$F = - \frac{\partial E}{\partial u}$$

$$E = E_0$$



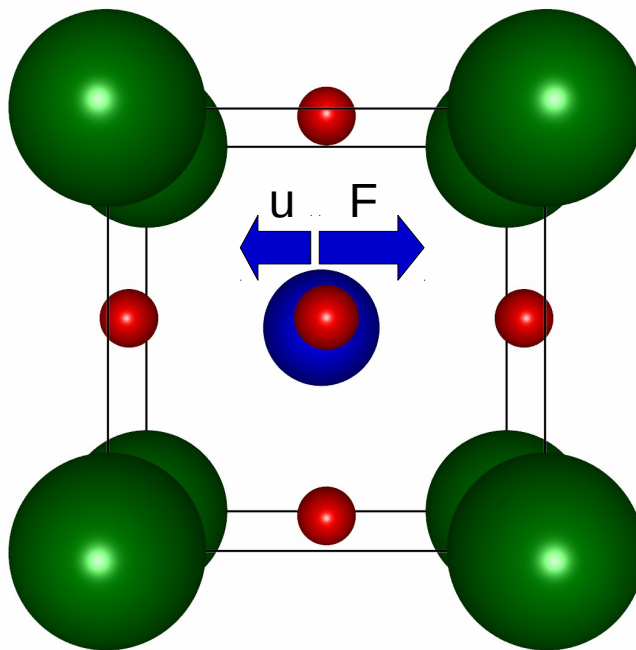
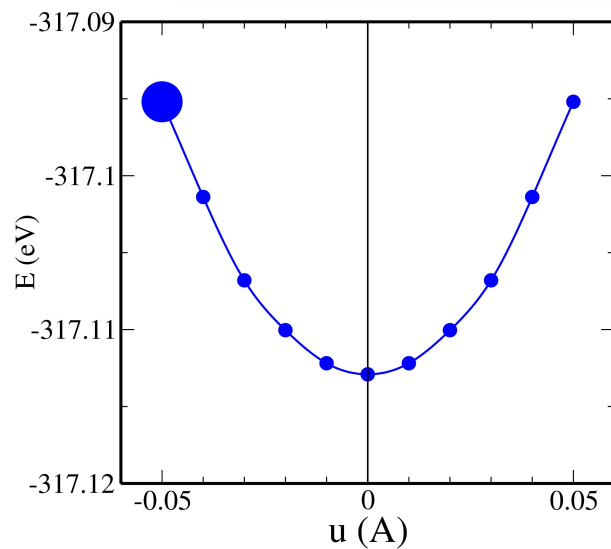
$$u = 0, F = 0$$



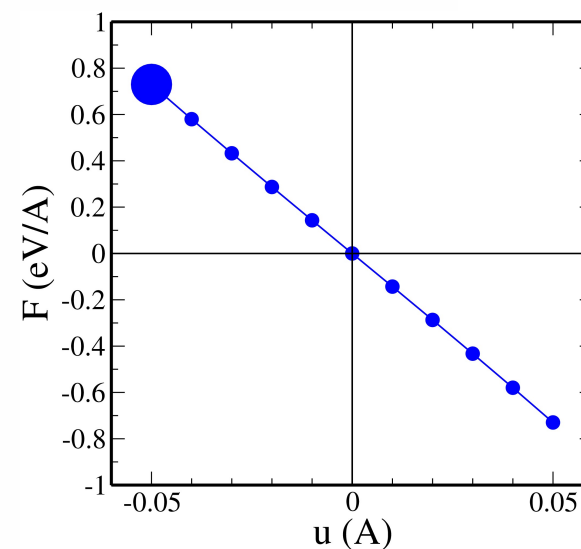
Siły Hellmanna-Feynmana

$$F = - \frac{\partial E}{\partial u}$$

$$E > E_0$$



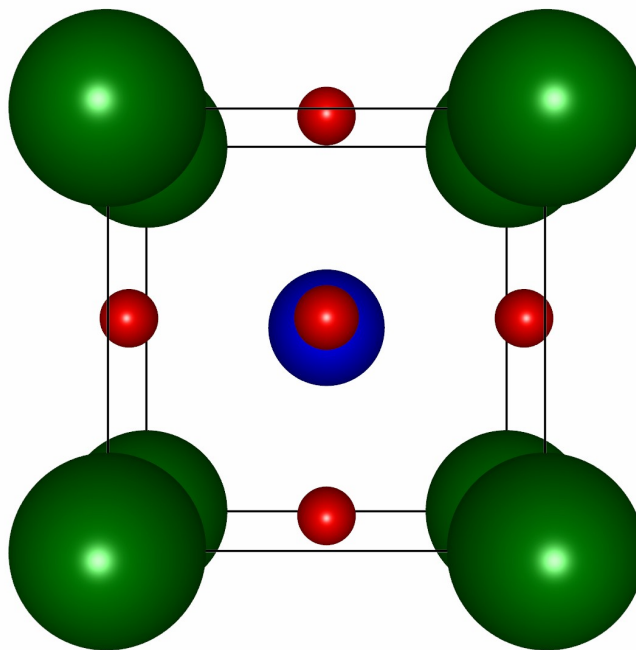
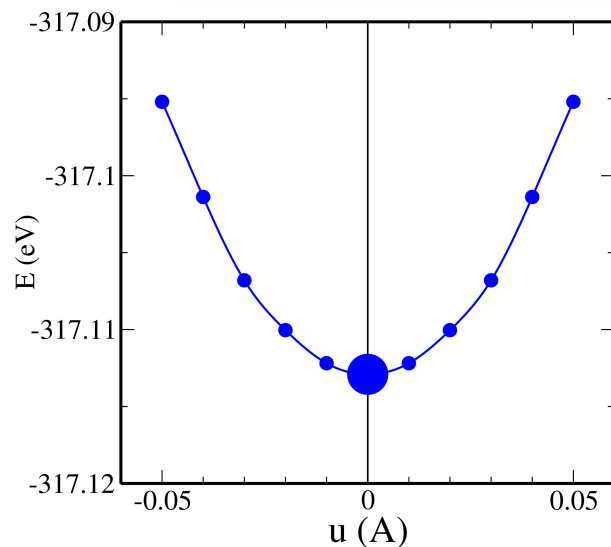
$$u < 0, F > 0$$



Siły Hellmanna-Feynmana

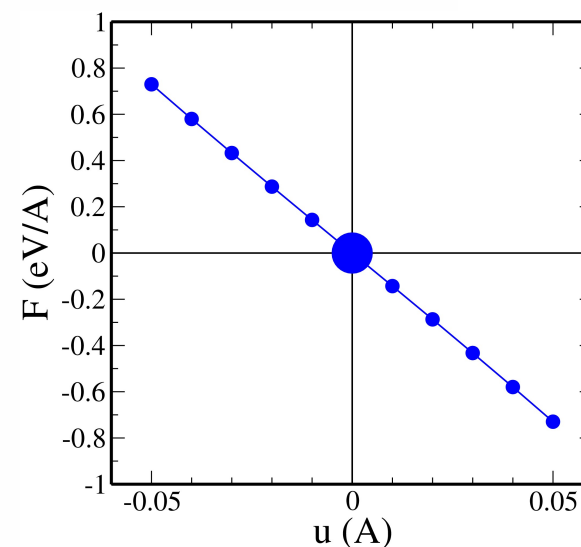
$$F = -\frac{\partial E}{\partial u}$$

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \kappa u^2$$



Przybliżenie harmoniczne

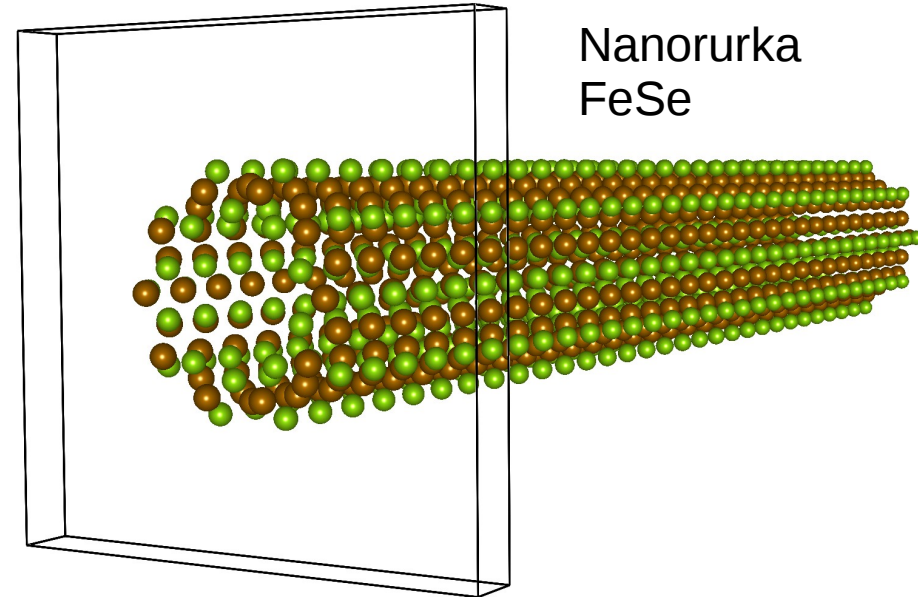
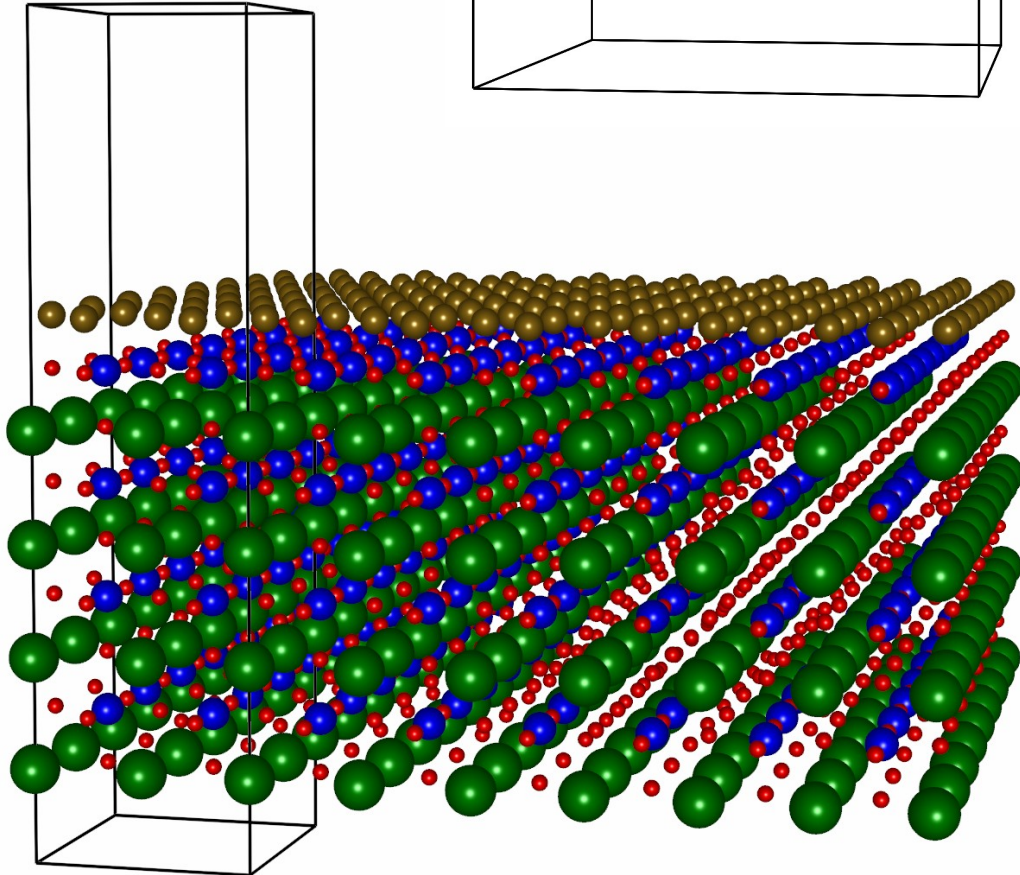
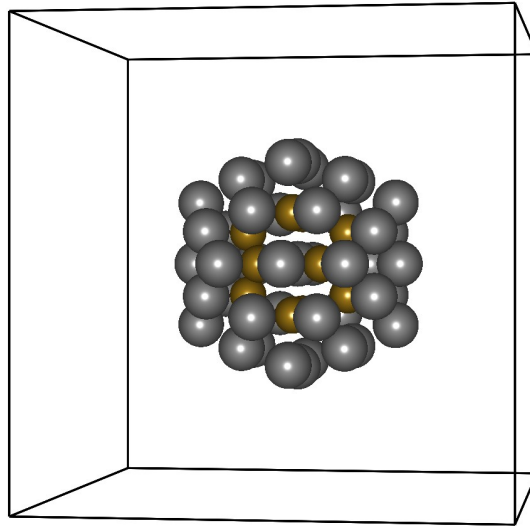
$$F = -\kappa u$$



$$\kappa = 14.32 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^2}$$

Nanostruktury

Nanocząstka
 $\text{Fe}_{12}\text{Pt}_{43}$



Nanorurka
 FeSe

Monowarstwa
 $\text{Fe/BaTiO}_3(001)$

Metody i tematyka badawcza

Obliczenia z pierwszych zasad

- teoria funkcjonału gęstości (DFT)
 - fonony (direct method)
- dynamika molekularna *ab initio*

Badane własności

- struktura krystaliczna
- struktura elektronowa
- własności elastyczne
 - magnetyzm
- własności dielektryczne
 - ładunki efektywne
- fononowe krzywe dyspersji
 - wektory polaryzacji
- fononowe gęstości stanów
- rozpraszanie w podczerwieni
 - rozpraszanie Ramana
- nieelastyczne rozpraszanie neutronów
- nieelastyczne rozpraszanie promieni X
 - funkcje termodynamiczne
 - miękkie mody
 - przejścia fazowe
 - diagramy fazowe
- defekty krystaliczne i domieszki



Badane układy

Materiały krystaliczne

Węglik krzemu - SiC
Minerały Mg_2SiO_4 Fe_2SiO_4

Brucyt $\text{Mg}(\text{OH})_2$

Wustyt Fe_xO

Magnetyt Fe_3O_4

Chalkopiryty

Pirokseny

Materiały magnetyczne MnAs

Nadprzewodniki Mo_3Sb_7

Ziemie rzadkie Eu, EuO, Sm, Nd

Związki aktynowców

PuCoGa_5 , UGe_2 , URu_2Si_2

Nanostruktury

- Nanocząstki FePt
- Monowarstwy Fe/W, FeO/Pt
- Multiwarstwy FePt, FeAu
- Powierzchnie Fe, MgO

Stopy nieuporządkowane FeCr

Projekty badawcze i współpraca



Pomiary metodą nieelastycznego rozpraszania neutronów i promieni X



Własności strukturalne i dynamiczne nanocząstek



Badanie własności fononowych cienkich warstw FeO/Pt(111)



NANODYNAMICS
A Helmholtz-University Young Investigators Group at ANKA

Własności magnetyczne i dynamiczne nanostruktur i tlenków ziem rzadkich



Fononowe własności multiwarstw Fe-Pt



Układy silnie skorelowane FeO, magnetyt

