

P13

Lviv Polytechnic National University

Department of applied materials science and materials engineering



DFT MODELING FOR MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING

V.V. Romaka

A.M. Trostianchyn

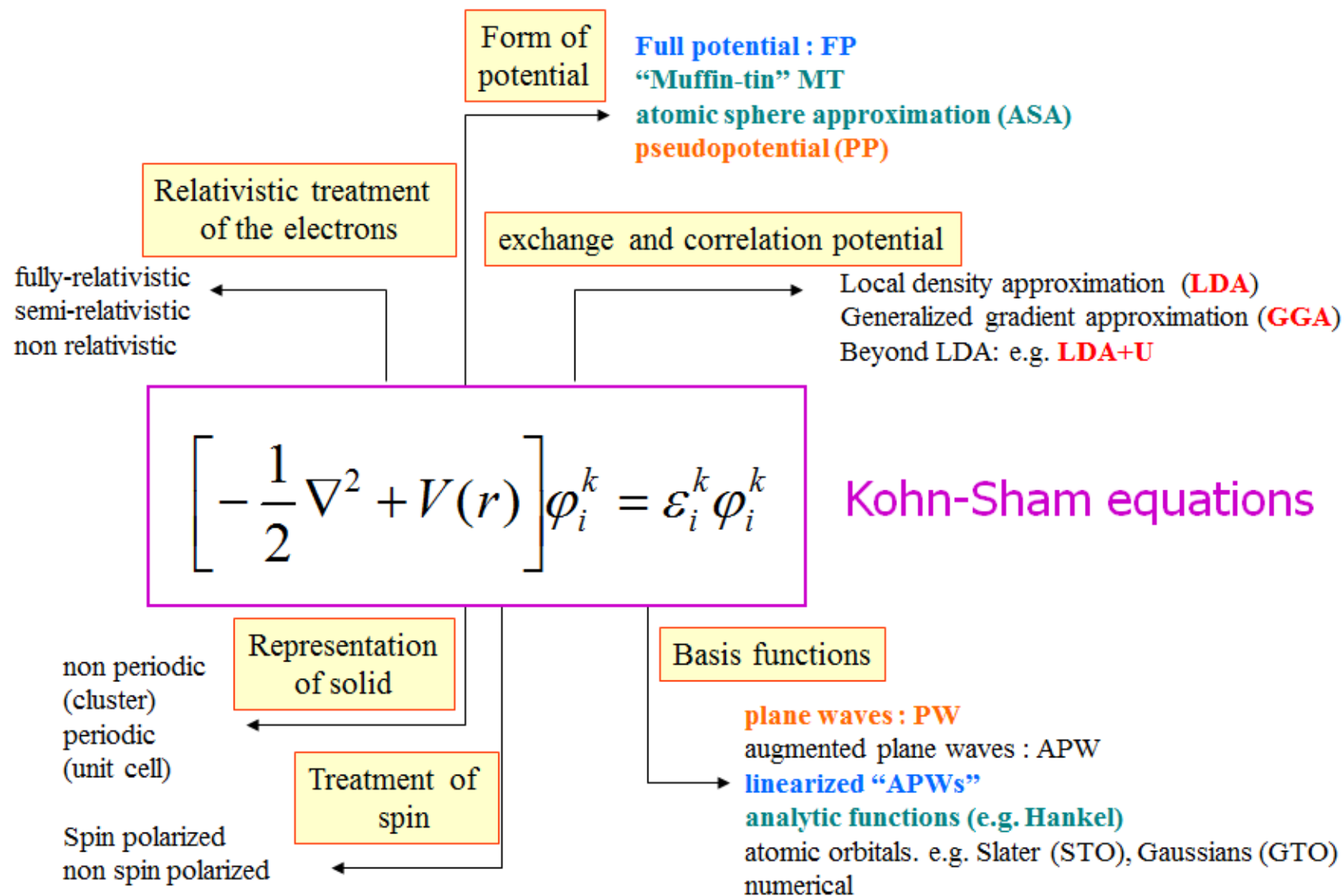
Cracow – 2015

Topics to cover:

- **What is DFT**
- **Why you may need it in your courses**
- **What tasks students solve with DFT**
- **An example of a practical task**

What is DFT

- Density functional theory (DFT) is a computational quantum mechanical modelling method used in physics, chemistry and materials science to investigate the electronic structure (principally the ground state) of many-body systems, in particular atoms, molecules, and the condensed phases. Using this theory, the properties of a many-electron system can be determined by using functionals.
- DFT covers a huge group of methods for solving quantum (Kohn-Sham) equations



Why you may need it in your courses

DFT methods allow to evaluate and predict:

- Type of material.
- Chemical bonding and electron density distribution.
- Basic and specific physical properties of materials.
- Model structure disorder: dislocations, point defects.
- Model multi-layer materials, absorption, adsorption.
- Evaluate the proper ways of material improvement.
- Thermodynamics.
- ...
- And even more...

What tasks students solve with a DFT

- Optimize the crystal structure of the material.
- Calculate the ground state energy and the density of electronic states.
- Calculate the distribution of the electron density and electron localization function.
- Calculate the solubility in solid solutions
- Magnetic moment calculation
- Evaluate the correct crystal structure (type)
- Predicts pressure induced phase transitions

“Anyone can do calculations nowadays.

Anyone can also operate a scalpel. That doesn't mean all our medical problems are solved.”

Karl Irikura

Курс: “Фізика конденсованого стану”

Практична робота №1: *ab initio* розрахунок магнітного моменту атомів Fe у структурі α -Fe

Необхідні знання та навички:

- кристалографічний опис структури та побудова її моделі у програмі VESTA;
- теоретичні основи *ab initio* методів розрахунку електронної структури;
- компіляція та інсталяція програм в середовищі ОС Linux.

Мета: провести *ab initio* розрахунки електронної структури α -Fe та оцінити отримане значення магнітного моменту атомів Fe.

Завдання:

- підготувати кристалічну структуру для розрахунків;
- створити вхідний файл для розрахунків;
- провести розрахунки та оцінити результат.

Вихідні дані:

- *Кристалографічні характеристики:*
 α -Fe (оцк гратка), просторова група $Im-3m$;
 параметр елементарної комірки $a = 0,2866$ нм;

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c
Fe	$2a$	0	0	0

- *Магнітні характеристики:*
 магнітний момент насичення атомів Fe у структурі α -Fe $\mu_{\text{ef}} = 2,217$ μB /атом.

Програмне забезпечення:

- пакет програм **elk 2.3.22** (elk.sourceforge.net);
- програма **VESTA 3.2.0** (jp-minerals.org/vesta/).

Послідовність виконання:

1. Підготовка кристалічної структури для розрахунків

УВАГА! Етап підготовки кристалічної структури для розрахунків є одним з найважливіших, оскільки найменша помилка призведе до хибної електронної структури матеріалу!

Для виконання поставленого завдання необхідно використати програму `spacegroup` з пакету програм `elk`, яка знаходиться в каталозі `elk-2.3.22/src/spacegroup/`. Вхідні параметри для цієї програми містяться у файлі `spacegroup.in`, який необхідно відредагувати згідно кристалографічних параметрів α -Fe:

```
'Im-3m'           : hrmg
5.415721844 5.415721844 5.415721844 : a, b, c
90 90 90          : bc, ac, ab
1 1 1            : ncell
.false.          : primcell
1                : nspecies
'Fe'             : spsymb, spfname
1                : nwpo
0 0 0
```

У рядку (`hrmg`) вказується скорочений символ Германа-Могена для просторової групи. Рядок (`a, b, c`) містить параметри елементарної комірки в атомних одиницях (а.о.). Для переходу від нм для а.о. необхідно значення кожного параметра комірки розділити на значення радіуса першої борівської орбіти (0,05292 нм). Рядок (`bc, ac, ab`) задає кути між відповідними парами базових векторів. Рядок (`ncell`) використовується для створення надкомірок у кожному з

2. Створення вхідного файлу для розрахунків

На другому етапі роботи необхідно створити у робочій області новий каталог `Fe_bcc`, у якому будуть міститися всі файли розрахунків електронної структури. У цьому каталозі необхідно також створити порожній файл `elk.in` і внести у нього наступні параметри та їхні значення для розрахунків:

```
tasks
0

xctype
20

spinpol
true

bfieldc
0.0 0.0 5.0

reducebf
0.5

autolinengy
true

mixtype
3

nempty
10

ngridk
8 8 8

sppath
'шлях_до_каталогу_з_програмою/elk-2.3.22/species/'
```

3. Розрахунки електронної структури та магнітного моменту

Запустити програму `elk` (каталог `elk-2.3.22/src/`), передавши їй в якості аргументу назву файлу `elk.in`. По завершенню розрахунків проаналізувати результати з останньої ітерації у файлі `INFO.OUT`, встановити магнітний момент атома Fe і порівняти його з експериментальним значенням, визначити абсолютну та відносну похибки розрахованого значення магнітного моменту. Встановити та порівняти сумарні магнітні моменти усіх атомів у muffin-tin сферах та цілому кристалі. Зробити висновки.

Джерела додаткової інформації:

- D.J. Singh and L. Nordstrom, *Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method* (Springer, 2006);
- sourceforge.net/p/elk/discussion/
- S. Altmann, *Band Theory of Solids: An Introduction From The Point Of View Of Symmetry* (Oxford Press, 1991);
- W. Koch, M. Holthausen, *Chemists Guide to Density Functional Theory* (Wiley-VCH, 2001);
- R. Martin, *Electronic Structure - Basic Theory & Practical Methods* (Cambridge University Press, 2004).

Курс: “Фізика конденсованого стану”

Практична робота №1: *ab initio* розрахунок магнітного моменту атомів Fe у структурі α -Fe

Студент	
Академічна група	
Дата виконання	

Аналіз результатів:

Висновки:

Національний університет “Львівська політехніка”

Кафедра прикладного матеріалознавства та обробки матеріалів, ст. вик. В.В. Ромака ©

4

Contacts.

Vitaliy Romaka

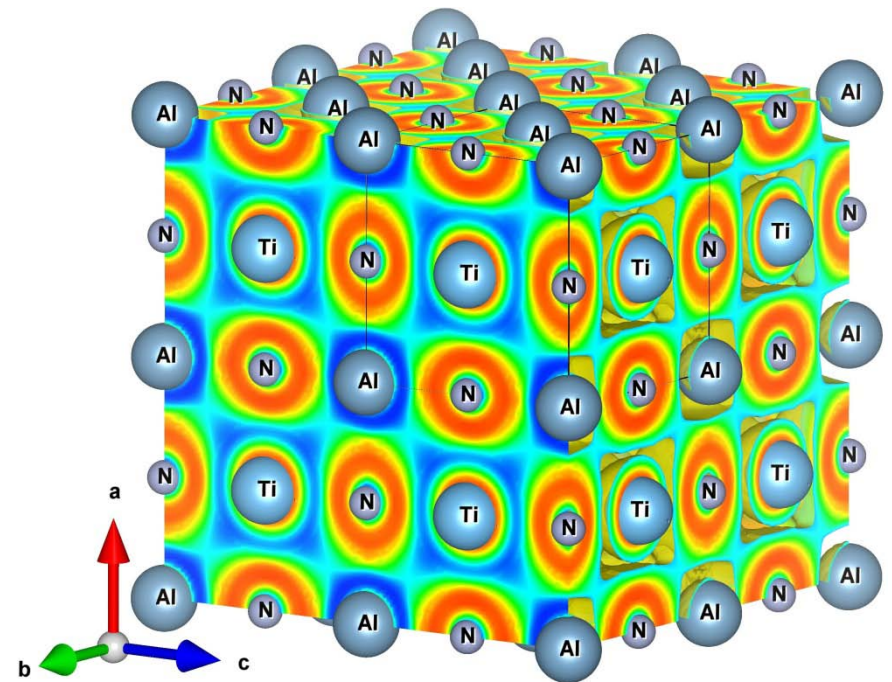
Lviv Polytechnic National University

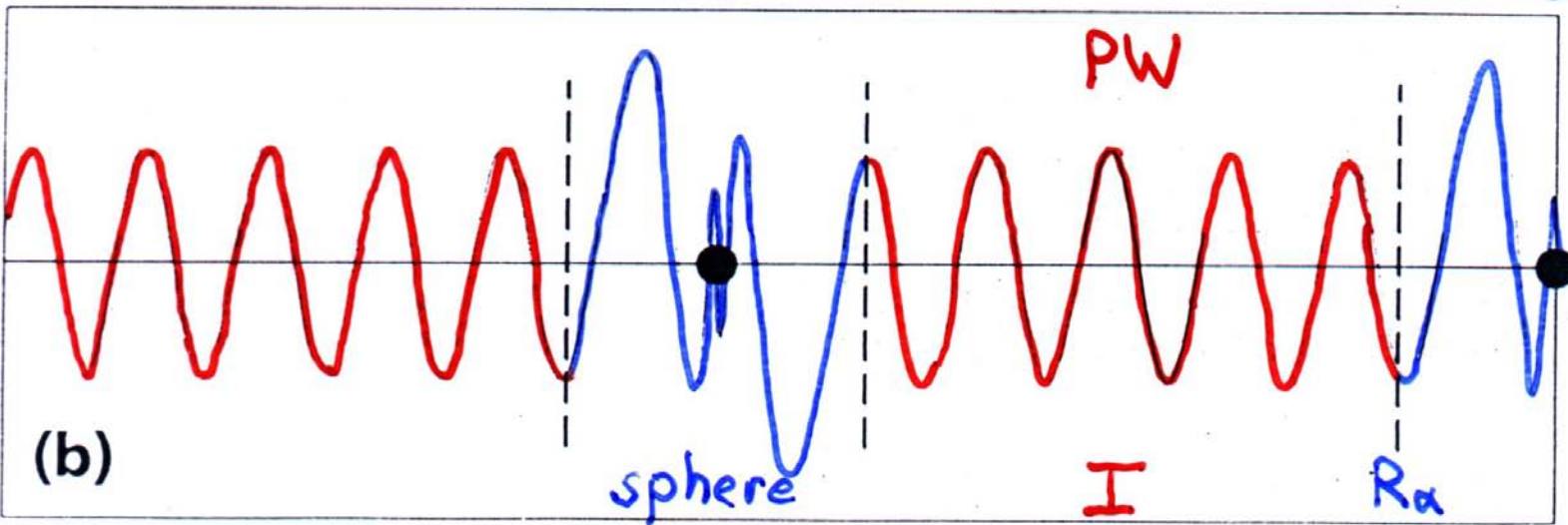
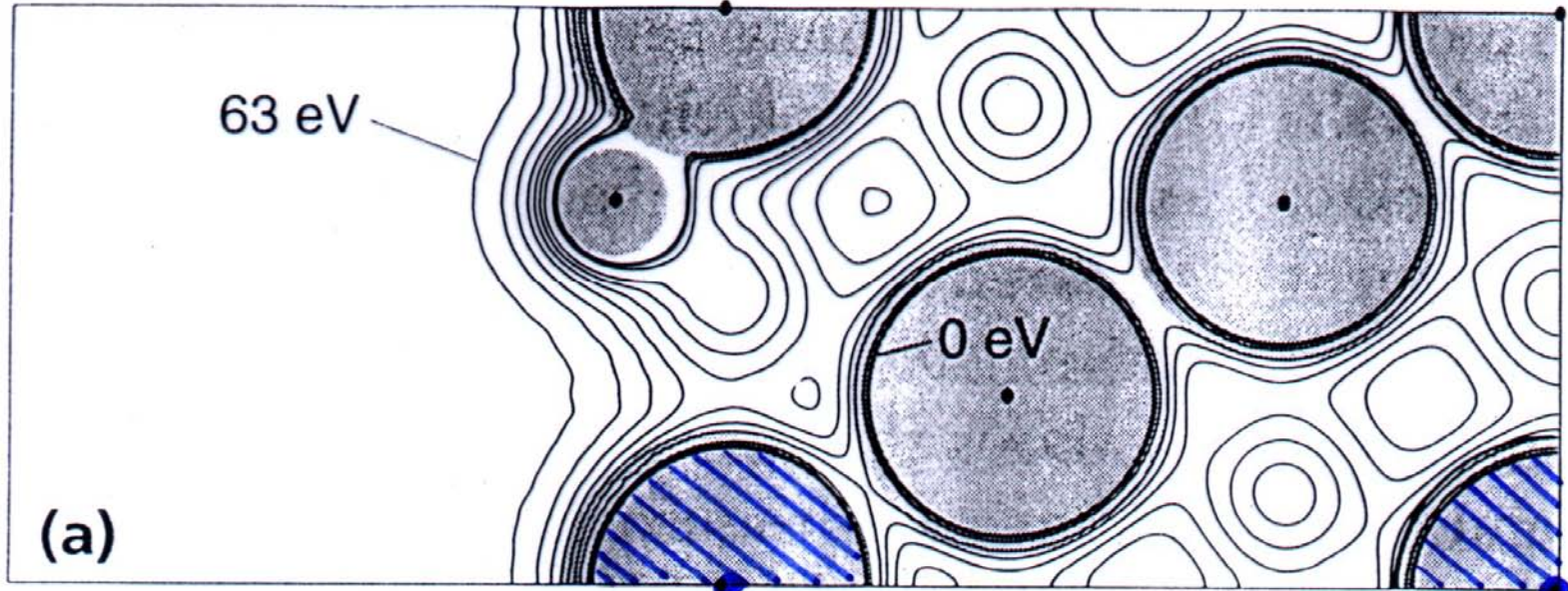
Department of materials science and
materials engineering

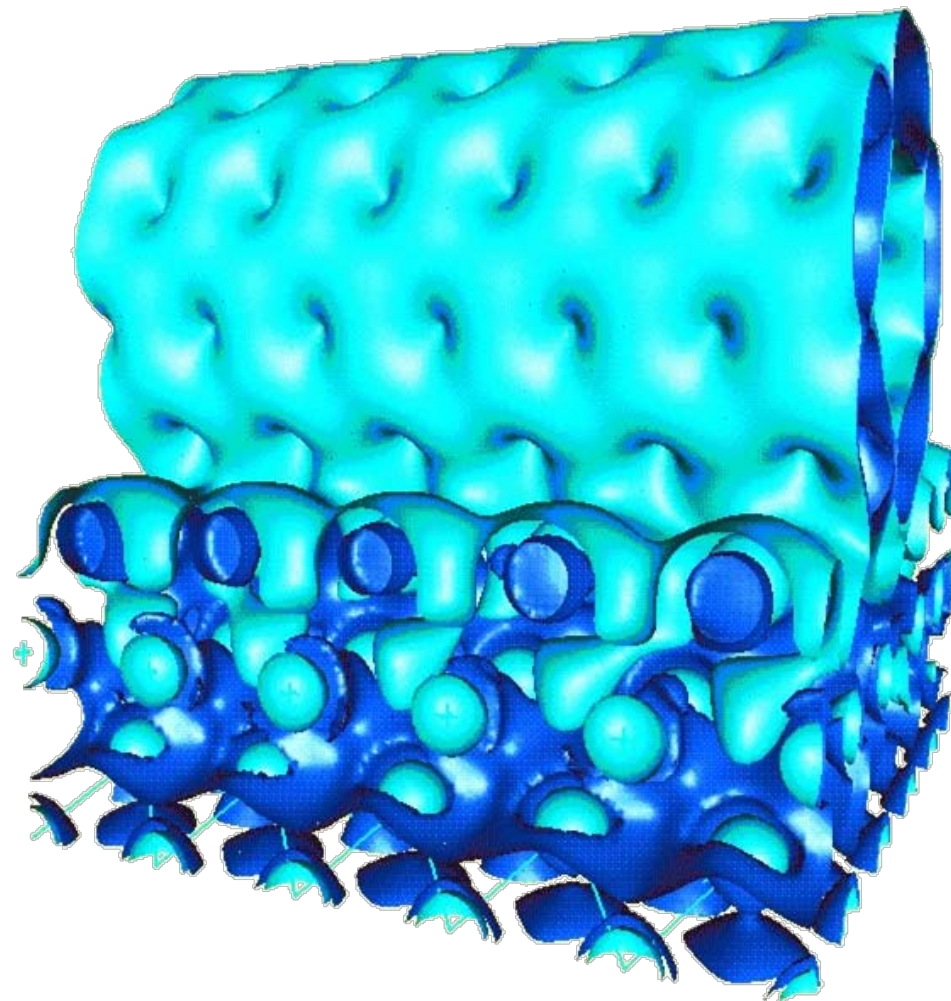
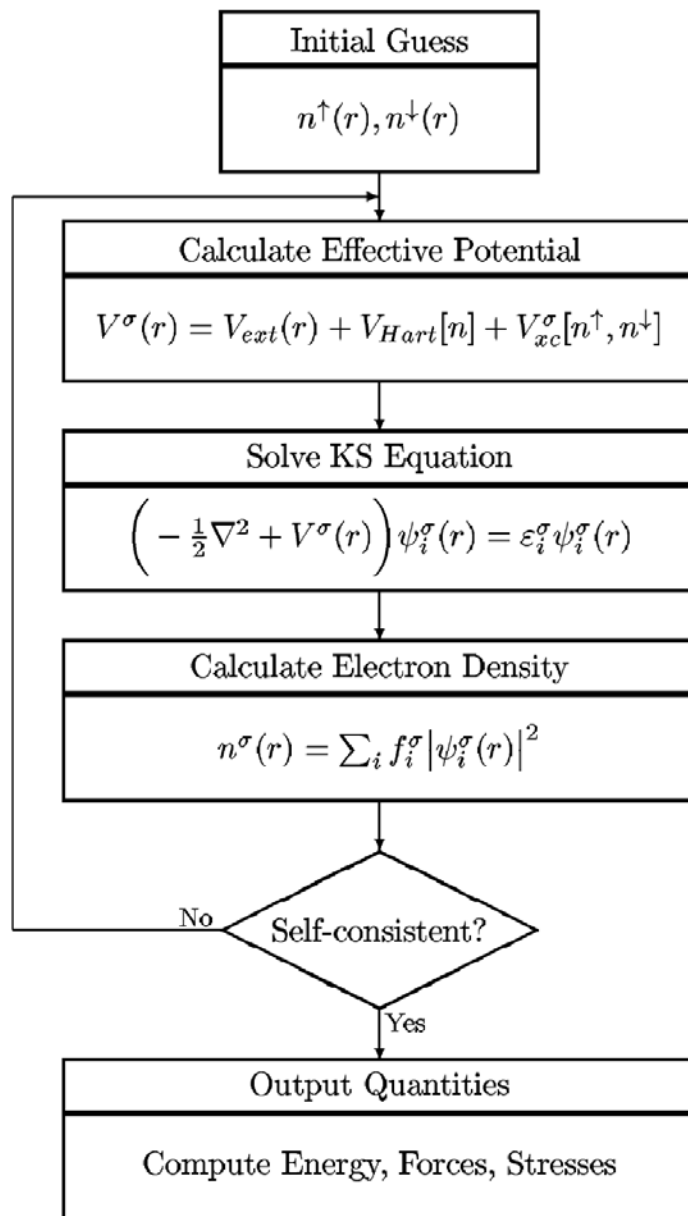
Ustyjanoycha 5 street

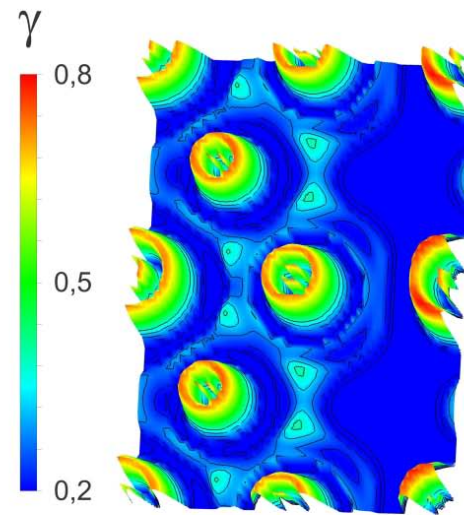
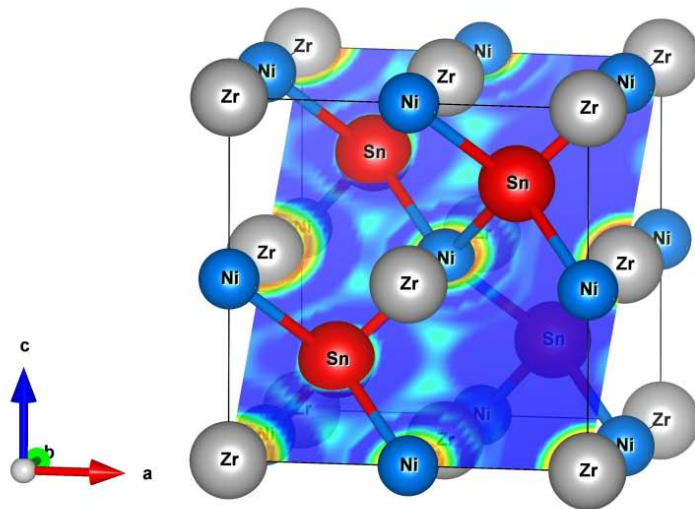
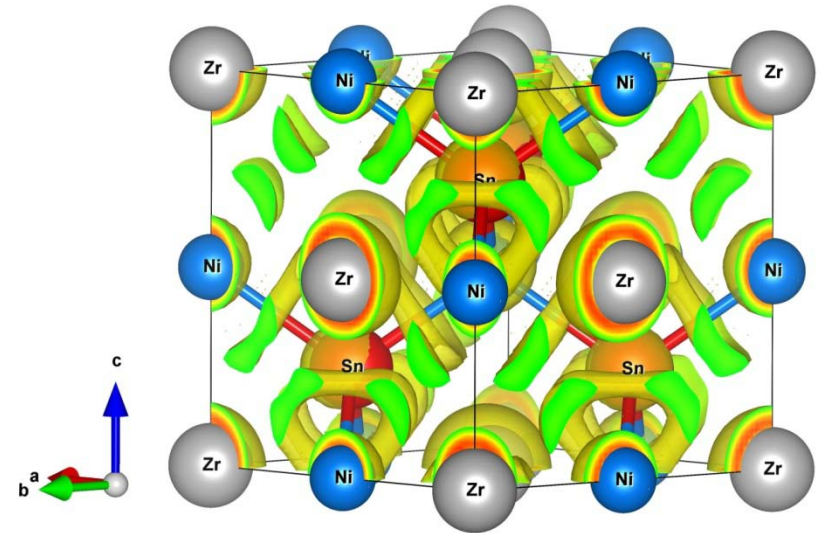
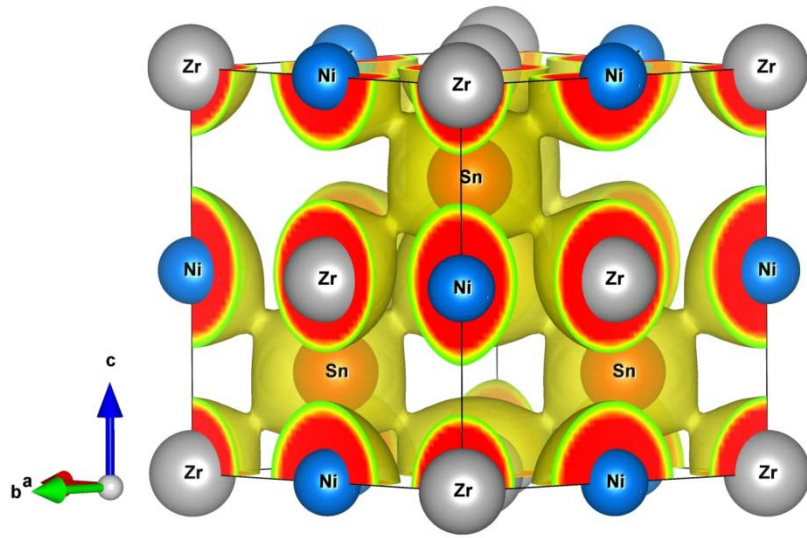
Tel. + 38 (032) 258 25 13

Email: romakav@lp.edu.ua



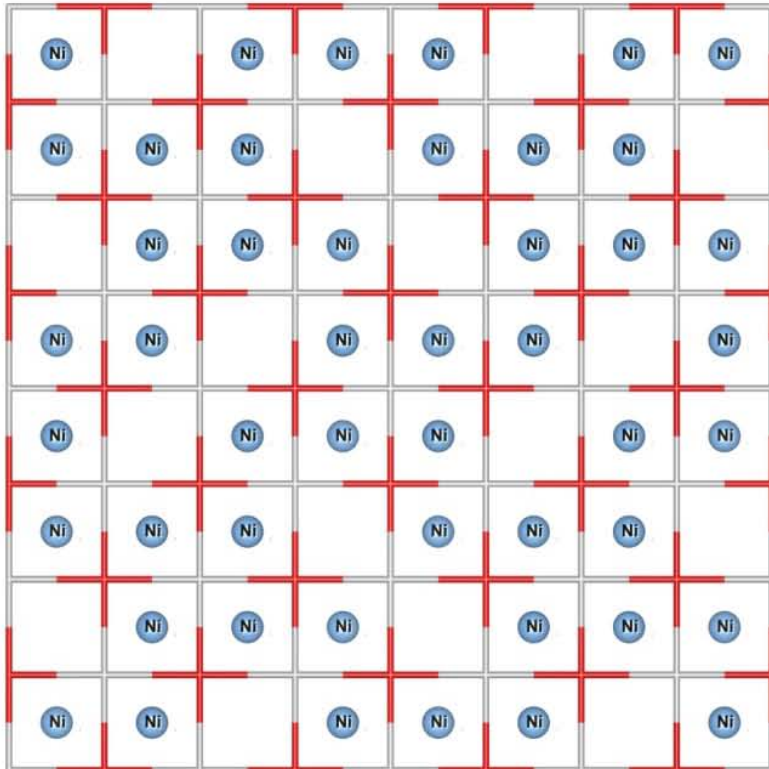






TiNiSn-TiNi₂Sn

Initial structure



Relaxed structure

