

ЗАВИСИМОСТЬ ТОЧНОСТИ ТВ-LMTO РАСЧЕТА ОТ КОЛИЧЕСТВА k -ТОЧЕК: ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРА СМЕШИВАНИЯ ИТЕРАЦИЙ ПО СХЕМЕ БРОЙДЕНА

А.А. Мирзоев, М.М. Ялалов, М.С. Ракитин

В работе рассматривается зависимость точности расчета электронной структуры, энергетических характеристик металлов методом ТВ-LMTO-ASA от количества k -точек в процедуре интегрирования по обратному пространству. Отслеживается влияние параметра смешивания итераций по схеме Бройдена. Расчет выполнен на примере чистого железа в решетке ОЦК.

Метод линеаризованных «маффин-тин» орбиталей (LMTO) [1, 2] является одним из самых быстрых и эффективных методов расчета электронной структуры кристаллических веществ из первых принципов. Этот метод успешно реализован в программном пакете ТВ-LMTO-ASA. Количество компьютерных ресурсов, требуемых для расчета, определяется несколькими параметрами: размером ячейки и количеством различных типов атомов в ней, степенью ее симметрии, а также точностью, которую необходимо получить исследователю.

Точность расчета, в свою очередь, также определяется несколькими параметрами, а именно: среднеквадратичным значением зарядового переноса между атомами в последней итерации, количество членов в сумме Эвальда, количество интервалов разбиения первой зоны Бриллюэна в процедуре интегрирования по обратному пространству и т.д. Самым времязатратным процессом в схеме вычислений является интегрирование по обратному пространству. Процедура численного интегрирования использует разбиение этого пространства на N узлов (k -точек). В целях экономии вычислительных ресурсов необходимо найти минимальное количество k -точек, при котором достигается необходимая точность вычислений.

Первоначально данный вопрос был затронут в работе [3], где для сохранения требуемой точности при изменении размера ячейки пришлось увеличивать количество k -точек (см. таблицу).

Таблица

Количество атомов	Количество k -точек	Тип расчета
1	$12 \times 12 \times 12$	Магнитный (точный)
2	$12 \times 12 \times 12$	Немагнитный (неточный)
2	$24 \times 24 \times 24$	Магнитный (точный)
16	$12 \times 12 \times 12$	Немагнитный (неточный)
16	$24 \times 24 \times 24$	Немагнитный (неточный)
16	$48 \times 48 \times 48$	Магнитный (точный)

Необходимая точность была достигнута, однако использованный прием идет в разрез с выводами теории. Действительно, объем суперячейки в прямом пространстве

$$V = \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c},$$

где $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ – примитивные векторы трансляции трехмерной решетки [4], пропорционален количеству атомов N_{at} , находящихся в этой ячейке, а объемы реальной и обратной ячейки обратно пропорциональны. Для достижения заданной точности интегрирования по зоне Бриллюэна, количество k -точек, на которые разбивается ячейка в обратном пространстве, N_k , должно быть пропорционально объему обратной ячейки. Отсюда следует, что при увеличении числа атомов в ячейке, количество точек в обратном пространстве, следует не увеличивать, а можно даже снижать по закону

$$N_k \sim 1/N_{\text{at}},$$

сохраняя при этом точность результата.

Причиной, по которой более раннее исследование давало неверный результат, является значение параметра смешивания итераций по схеме Бройдена. Для проверки был еще раз повторен расчет одной и той же суперячейки при одинаковом значении всех параметров, кроме параметра смешивания (β). При $\beta = 0,5$ расчет сошелся к немагнитному варианту, а при $\beta = 0,01$ – к магнитному. Таким образом, был сделан вывод о необходимости использования малого параметра смешивания для расчетов магнитных систем. Механизм влияния изучен не был, но этот вопрос представляет большой интерес для будущих исследований.

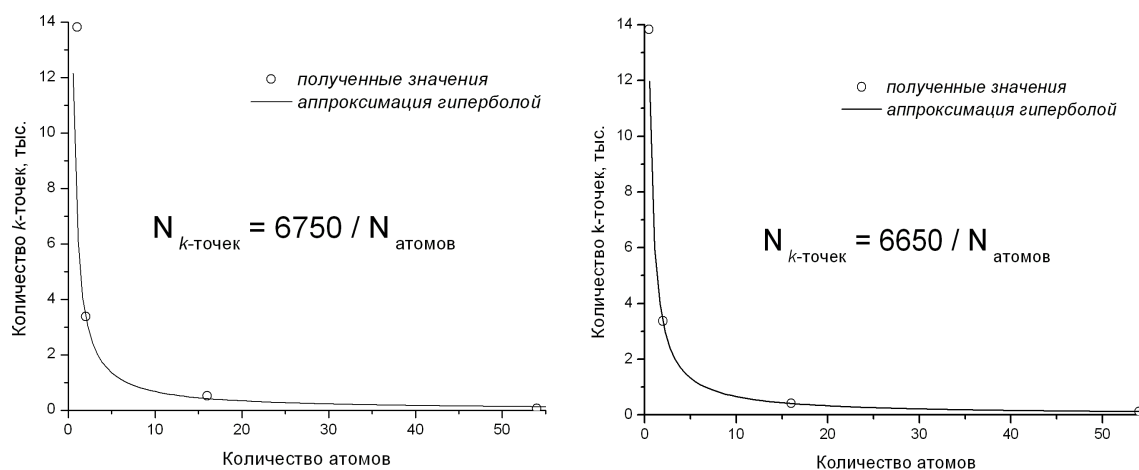


Рис. 2. Зависимость количества k -точек, необходимого для получения точности, большей 0,01 мРб, от числа атомов в элементарной ячейке для магнитного (слева) и немагнитного (справа) состояний

Выводы

На примере расчетов чистого железа был проведен анализ зависимости точности значений полной энергии для разного количества атомов в элементарной ячейке, получаемых методом ЛМТО, от количества k -точек в процедуре интегрирования по обратному пространству. Мы считаем, что данная закономерность справедлива не только для Fe, но и для близких к нему переходных металлов, а также, что важно, их сплавов, находящихся как в магнитном, так и в немагнитном состояниях. Знание минимального количества k -точек, необходимого для достижения заданной точности, позволяет значительно сократить требования к компьютерным ресурсам.

Важным моментом является использование малого параметра смешивания итераций по схеме Бройдена. Излишне быстрая сходимость приводит к неправильному результату даже для очень большого количества k -точек.

Результаты данной работы могут быть полезными для специалистов, работающих в области численного моделирования металлов и сплавов методом ЛМТО, и будут широко использоваться в работе научных групп кафедры и университета.

Литература

1. Andersen O.K., Jepsen O. Explicit, First-Principles Tight-Binding Theory// Phys. Rev. Let., 53. – 1984. – P. 2571–2574.
2. Tank R.W., Arcangeli C. An Introduction to the Third-Generation LMTO Method// Phys. stat. sol. (b), 217. – 2000. – P. 89.
3. Ялалов М.М., Мирзоев А.А. Особенности расчетов энергии смещения сплавов замещения переходных металлов методом ЛМТО// Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 3. – № 6 (22). – С. 45–49.
4. Блейкмор Дж. Физика твердого тела. – М.: Мир, 1988. – 608 с.
5. Vanderbilt D., Louie S.G. Total energies of diamond (111) surface reconstructions by a linear combination of atomic orbital method// Phys. Rev. B., 30. – 1984. – P. 6118–6130.

Поступила в редакцию 5 июля 2005 г.