

## 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  $N_{\text{at}}$ , 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.

Указанное несоответствие результатов теории и эмпирического результата работы [3], Привело к необходимости более подробного исследования проблемы. Данная работа направлена на выявление причин, приведших к неверным выводам в предыдущей работе, и поиску правильного значения количества  $k$ -точек, необходимых для достижения некоторой точности.

### Методика расчета

В данной работе рассматривались элементарные ячейки объемно-центрированной решетки, составленные из 1, 2, 16, 54 атомов Fe. Количество  $k$ -точек вдоль каждого вектора трансляции принимало следующие значения: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 12, 15, 18, 24, 48. Для суперячеек с 16 и 54 атомами варианты с большим количеством  $k$ -точек не рассматривались. Были рассмотрены магнитный (спинполяризованный) и немагнитный случаи. Параметр решетки брался равным 5,285 а.е.

Для того, чтобы оценить точность полученных значений, необходимо некоторое «эталонное» значение, с которым бы они сравнивались в дальнейшем. В качестве такого значения было взято значение энергии для элементарной ячейки, состоящей из одного атома Fe, при максимальном рассмотренном значении количества  $k$ -точек –  $48^3$ . Полная энергия для этого состояния в магнитном и немагнитном случае равна соответственно  $-2542,00944750$  и  $-2541,98472200$  Рб.

Далее проводился расчет полной энергии для элементарных ячеек, содержащих 2, 16 и 54 атома, и вычислялось отклонение полученного значения от эталонного ( $\Delta E$ ). Если результаты для какого-то количества  $k$ -точек отличались от эталона не более, чем на  $10^{-6}$  Рб, то расчеты для большего количества  $k$ -точек не проводились в целях экономии компьютерных ресурсов.

Важную роль при расчетах играет параметр  $\beta$  – параметр смешивания итераций по схеме Бройдена [5], который по умолчанию берется равным 0,5. В наших расчетах он был равен 0,01.

### Результаты

Результаты расчета перечисленных выше элементарных ячеек для магнитного и немагнитного случаев приведены на рис. 1.

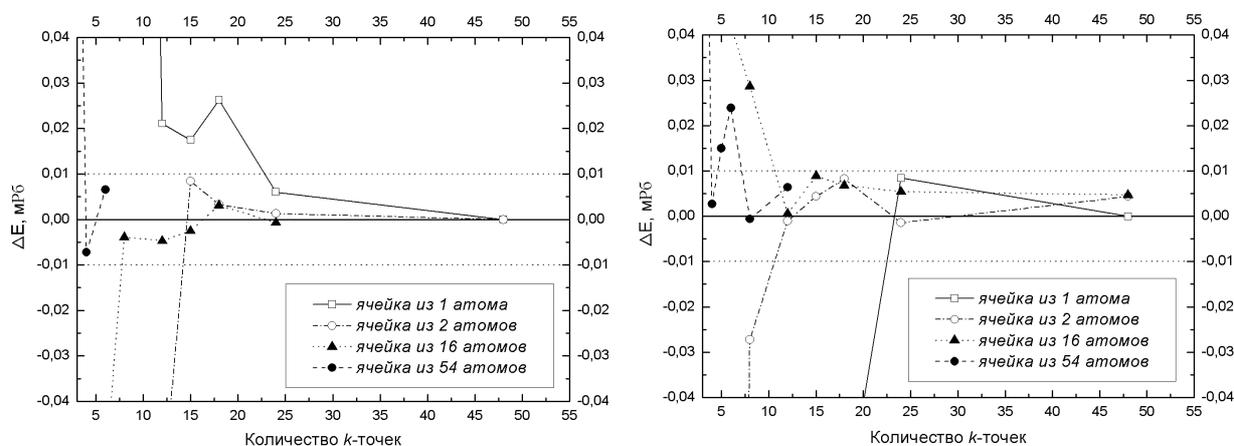


Рис. 1. Точность расчета от количества  $k$ -точек в магнитном (слева) и немагнитном (справа) случаях

Видно, что чем больше атомов в элементарной ячейке, тем меньше  $k$ -точек необходимо использовать, чтобы получить заданную точность как в магнитном, так и в немагнитном случаях. Например, для ячейки из 16 атомов Fe в магнитном состоянии точность (отклонение от эталона) в 0,01 мРб достигается при  $8^3$   $k$ -точках. Это объясняется тем, что при переходе в обратное пространство размер первой зоны Бриллюэна тем меньше, чем больше элементарная ячейка, и поэтому необходимо меньшее количество  $k$ -точек, чтобы при интегрировании зон Бриллюэна была получена заданная точность.

Для проверки этого результата мы построили зависимость количества  $k$ -точек, необходимых для достижения точности в 0,01 мРб, от количества атомов в элементарной ячейке (рис. 2).

Из рис. 2 видно, что результаты расчета хорошо согласуются с теорией. Коэффициент пропорциональности для обоих случаев получился примерно одинаковым. То есть немагнитный случай требует столь же точного рассмотрения, как и магнитный, несмотря на почти двойное уменьшение числа параметров.

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 ( $\beta$ ). 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.

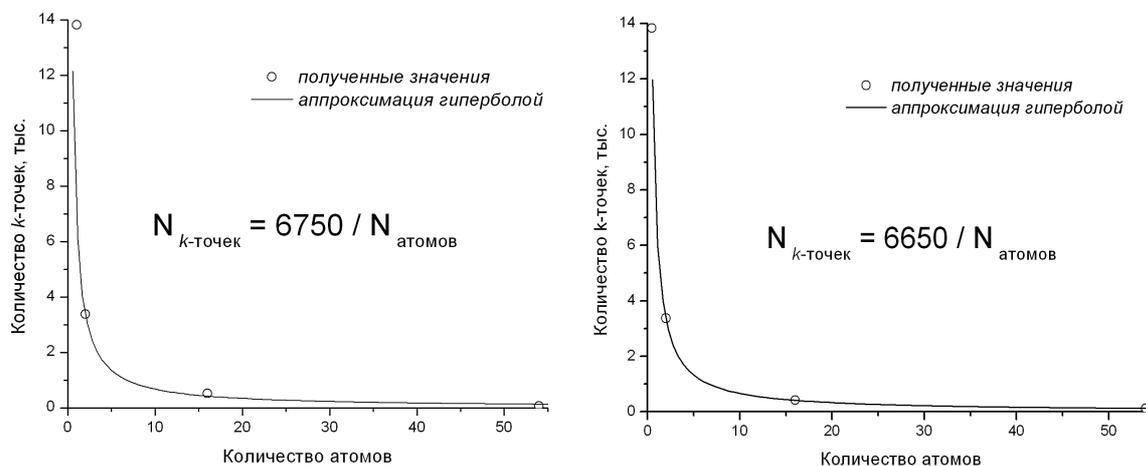


Рис. 2. Зависимость количества  $k$ -точек, необходимого для получения точности, большей 0,01 мРб, от числа атомов в элементарной ячейке для магнитного (слева) и немагнитного (справа) состояний

## 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 смешения 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.