

Vizualizace pásové struktury ve 3D

SFG projekt

Školitel: RNDr. Karel Carva, Ph.D.

Konzultant: Doc. RNDr. Ilja Turek, DrSc.

Obor: FOF

Upoutávka

Pásová struktura je jednou z klíčových charakteristik materiálů při jejich ab initio výpočtech. Běžným způsobem jejího zobrazení je 2D graf zachycující řez v recipročním prostoru, který se používá pro svoji přehlednost a jednoduchou fyzikální interpretaci. Jedná se o zachycení trojrozměrného prostoru ve zjednodušené podobě, nevýhoda tohoto zobrazení je zřejmá: ztráta informace o kompletních vlastnostech studovaného systému. U většinu krystalických materiálů nejde o problém zásadní a výhody tohoto zjednodušeného zobrazení převáží nad nevýhodami, neboť zajímavé vlastnosti plynou z pásové struktury na bodech a liniích s vysokou symetrií. V posledních letech se ale nachází stále více materiálů, jejichž zajímavé vlastnosti plynou z tvarů energetických pásů poblíž Fermiho meze, například topologické izolátory, a je vhodné mít přesnější představu o jejich průběhu. U materiálů jako jsou například Weylovy polokovy navíc hrají zásadní roli oblasti v recipročním prostoru ležící mimo běžně vykreslovaných linií s vysokou symetrií.

Součástí získání přehledu o způsobu výpočtů materiálových parametrů z prvních principů a cílem je rozšíření softwaru nyní používaných v teoretické skupině na KFKL za účelem vizualizace pásové struktury pevných látek v okolí Fermiho meze.

Projekt je vhodný především pro zájemce o budoucí studium teorie pevných látek, ale z širšího pohledu pro všechny, kdo mají zájem získat přehled o ab initio výpočtech.

Další informace: RNDr. Karel Carva, Ph.D., e-mail: carva@karlov.mff.cuni.cz

Zásady pro vypracování

1. Studium základních pojmů a metod z oboru kondenzovaných látek
2. Detailní seznámení se s pásovou strukturou krystalů a sepsání požadavků na tvořený program
3. Konverze několika možných vstupních formátů dat do jednotné podoby
4. Tvorba programu nebo skriptů za účelem zjednodušení tvorby 3D grafů pásové struktury v okolí Fermiho meze

Literatura

1. C. Kittel. Introduction to Solid State Physics. Wiley, 2004.
2. I. Turek, V. Drchal, J. Kudrnovský, M. Šob, P. Weinberger. Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces and Interfaces. 1997. (Kluwer, Boston), ISBN: 0-7923-9798-3.
3. I. Turek, J. Kudrnovský, V. Drchal, L. Szunyogh, and P. Weinberger. Interatomic electron transport by semiempirical and ab initio tight-binding approaches. Phys. Rev. B, 65:125101, Feb 2002.
4. N. W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics, Harcourt College Publishers, Philadelphia 1976