INTERPOLATION SCHEME FOR TRANSITION METAL BAND STRUCTURES

Mr. Samphao Chongchitta

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1976

i 1791291X

อินเทอร์โปเลชั่นสกีมสำหรับโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะทรานซิชั่น

นาย สำเภา จงจิตต์

005421

วิทยานิพนธ์นี้ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
แผนกวิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2519

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science.

Visid Prachuabmoh
.....
(Professor Dr. Visid Prachuabmoh)
Dean

Theais Committee

Wijit Senghaphan .....Chairman
(Dr. Wijit Senghaphan)

Kopr Kritayakirana .....Advisor
(Dr. Kopr Kritayakirana)

Virulh Sayakanit .....Member
(Dr. Virulh Sayakanit)

A. Tachagumpuch .....Member
(Dr. Anantasin Tachagumpuch)

Thesis Advisor: Dr. Kopr Kritayakirana

Copyright 1976
by
The Graduate School
Chulalongkorn University

Thesis Title: Interpolation Scheme for Transition Metal Band Structures

By : Mr. Samphao Chongchitta

Department : Physics

Thesis Title	Interpolation Scheme for Transition Metal Band Structures
Name	Mr. Samphao Chongchitta
Department	Physics
Academic Year	1976

ABSTRACT

A modified interpolation scheme for the band structure of transition metals was developed. It combines features of Hodges' scheme for accounting for the tight-binding d-bands, the pseudo-potential conduction bands and their hybridization together with features of Mueller's scheme for accounting for the orthogonalization effects. An algebraic procedure was also developed to extract the interpolation parameters explicitly. The new "hybrid" scheme was tested with the case of paramagnetic fcc copper by numerical computation on a digital computer. The interpolated bands reproduced the reference bands with very good accuracy, the largest deviation being 0.07 rydberg. Rms deviation for the six lowest bands at 89 points in the Brillouin zone was 0.18 eV. The scheme is very efficient and takes 9 minutes on an IBM-360 to reproduce the full band structure of copper.

หัวข้อวิทยานิพนธ์ อินเทอร์โปเลชันสกีมสำหรับโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะทรานซิชัน

ชื่อ นาย สำเภา จงจิตต์

ปีการศึกษา 2519

บทคัดย่อ

งานนี้ได้พัฒนาอินเทอร์โปเลชันสกีมแบบผสมสำหรับการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของโลหะทรานซิชัน โครงสร้างของสกีมผสมส่วนหนึ่งมีลักษณะเหมือนสกีมของฮอดเจสสำหรับการคำนวณแถบพลังงานของค็-อิเลคตรอน แถบพลังงานของคอนดัคชันอิเลคตรอนและโฮบริไดเซชันของอิเลคตรอนทั้งสองพวก อีกส่วนหนึ่งมีลักษณะเหมือนสกีมของมูลเลอร์ที่คำนึงถึงผลของออร์ทอกอนาไลเซชันระหว่างอิเลคตรอนทั้งสองพวก ได้คิดหากระบวนการพีชคณิตสำหรับคำนวณหาพารามิเตอร์ที่ใช้ในสกีมทีละค่า ได้มีการใช้สกีมผสมนี้ทำการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของธาตุทองแดงในสภาวะพาราแมกเนติกโดยเครื่องคอมพิวเตอร์ ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าสกีมผสมนี้สามารถเลียนโครงสร้างแถบพลังงานได้ใกล้เคียงกับโครงสร้างแถบพลังงานค้นแบบมาก ค่าพลังงานที่คลาดเคลื่อนมากที่สุดมีค่า 0.07 ริดเบอร์ก ค่าเฉลี่ยเบนอาร์เอ็มเอสมีค่า 0.18 อิเลคตรอนโวลต์ สกีมผสมนี้มีประสิทธิภาพสูง การคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของทองแดงอย่างสมบูรณ์แบบใช้เวลาประมาณ 9 นาที เมื่อทำการคำนวณด้วยเครื่องคอมพิวเตอร์ไอบีเอ็ม-360

ACKNOWLEDGMENTS

I wish to express my gratitude to Dr. Kopr Kritayakirana for his guidance and supervision during the course of the present researce. His unending patience and assistance are deeply appreciated. I also thank him for improving my English manuscript.

I am indebted to Dr. Virulh Sayakanit for many useful discussions on my work. I also wish to acknowledge the excellent service and advice by the staff of the Computer Science Center of Chulalongkorn University for certain parts of the numerical computation.

I am indebted to the University Development Commission, National Education Council, for financial support during my first two years in the Graduate School of Chulalongkorn University. I am also indebted to my supervisor for financial support for the main part of the numerical computation.

CONTENTS

page

ABSTRACT..... iv

ACKNOWLEDGMENTS..... vi

LIST OF TABLES..... ix

LIST OF FIGURES..... xi

CHAPTER I INTRODUCTION..... 1

CHAPTER II INTERPOLATION SCHEME..... 7

1 The Basis of the Interpolation Scheme..... 7

2 The Framework..... 18

3 The LCAO-LCAO Block..... 29

4 The OPW-OPW Block..... 33

5 The OPW-LCAO Block..... 50

6 Summary of Parameters..... 54

CHAPTER III EXPLICIT EXTRACTION OF PARAMETERS..... 55

1 Pure d States..... 57

2 Pure Conduction States..... 61

3 Hybridized States..... 70

4 Algebraic Solution for the Parameters..... 77

CHAPTER IV THE COMPUTATION, RESULTS, AND DISCUSSIONS..... 84

1 The Computation..... 84

page

		The Scheme of Computation.....	84
		The Process of Computation.....	86
	2	The Results.....	90
	3	Discussions.....	124
	4	Conclusion.....	128
APPENDIX A		SYMMETRIZED PLANE WAVES.....	131
APPENDIX B		SYMMETRIZED LCAO's.....	133
APPENDIX C		FORTRAN IV PROGRAM FOR A HYBRID SCHEME.....	135
APPENDIX D		EXTRAPOLATION AND INTERPOLATION FOR EVALUATING THE MISSING REFERENCE EIGENVALUES.....	155
BIBLIOGRAPHY.....			169
VITA.....			172

LIST OF TABLES

Table — page

2-1 Values of symmetrizing factors $F_{\vec{K}_\nu}(\vec{k})$ at various symmetry points..... 47

4-1 Paramagnetic copper band energies from Burdick's APW calculation for the lowest 9 bands at 89 points in 1/48 of the primitive cell in the Brillouin zone..... 93

4-2 Values of interpolation scheme parameters used for fitting Burdick's APW bands for paramagnetic copper with the hybrid interpolation scheme..... 97

4-3 Energy eigenvalues at 89 points for nine bands of hybrid scheme..... 98

4-4 Paramagnetic copper energy eigenvalues in rydbergs at 89 points for nine lowest bands computed with the interpolation scheme without including orthogonalization effects (Hodges scheme)..... 102

4-5 Deviation of the interpolated bands from the reference bands..... 106

Table page

4-6 Comparison of band energies at certain points in the Brillouin zone for eigenvalues calculated with the different schemes of interpolation and those of Burdick calculated with the APW method..... 116

LIST OF FIGURES

Figure		page
2-1	The crystal potential in the muffin-tin approximation and the resulting conduction band and d band overlap.....	11
2-2	Fcc transition metal d bands, conduction bands, and hybridized bands.....	15
2-3	The 1/48 primitive cell in the Brillouin zone of the fcc lattice in which $k_y \geq k_x \geq k_z \geq 0$.....	19
2-4	The values of linear cut-off in the orthogonalization form factor f(k) at various region of k.....	40
2-5	The values of linear cut-off in the hybridization form factor g(k) at various region of k.....	43
4-1	Comparison of the interpolated bands obtained in hybrid scheme with the reference bands of Cu (Burdick's APW bands)....	120
4-2	Comparison of Burdick's APW bands for Cu with the interpolated bands obtained in Hodges' scheme.....	122