

ВЫЧИСЛЕНИЕ ФОНОННОГО СПЕКТРА ЧЕРНОГО ФОСФОРЕНА

С использованием пакета EPW, относящегося к пакету Quantum ESPRESSO, вычислена плотность состояний фононов в черном фосфорене. Результаты сравниваются с данными экспериментов.

Черный фосфорен, фононный спектр.

Konchenkov Vladimir Igorevich, Polyanskiy Eugenyi Olegovich

A CALCULATION OF BLACK PHOSPHORENE PHONON SPECTRUM

Using the EPW package related to the Quantum ESPRESSO package, the density of phonon states in black phosphorene was calculated. The results are compared with experimental data.

Black phosphorene, phonon spectrum.

Введение

Черный фосфорен – двумерный материал, экспериментально открытый в 2014 году, обладает рядом интересных свойств, в том числе существенной анизотропией энергетического спектра [1-4]. Для исследования транспортных свойств этого материала необходимо знать типы фононов, присущих этому материалу, их законы дисперсии, а также коэффициенты электрон-фононного взаимодействия (см., например, [5]). В работе [6] приведены экспериментальные исследования фононных спектров фосфорена. В работе [7] фононные спектры фосфорена исследуются теоретически. В настоящей работе предпринята попытка проделать вычисление плотности состояний фононов в фосфорене при помощи пакета EPW [8], входящего в состав Quantum ESPRESSO [9].

Моделирование фононного спектра черного фосфорена в пакете EPW

В работе использовался пакет Quantum ESPRESSO версии 7.3. Установка и настройка пакета EPW в составе Quantum ESPRESSO (QE) выполнялась согласно рекомендациям [8].

Создаем папку phosphorene в директории QE.

Для проведения расчета scf создаем файл pscf.in, в котором определяем базовые настройки, а также задаем положение атомов в моделируемой ячейке фосфорена. В разделе control задан тип расчета, префикс, который будет использован при формировании имен выходных файлов, определяется шаг по времени, частота сохранения промежуточных результатов в файлы.

```
&control
  calculation      = 'scf'
  prefix           = 'phosphorene'
  restart_mode     = 'from_scratch'
  wf_collect       = .true.
  pseudo_dir       = './ps'
  outdir           = './'
  tprnfor          = .true.
  tstress          = .true.
  nstep            = 1000
  iprint           = 1
  isave            = 100
  dt               = 2.0
  ndw              = 50
  etot_conv_thr    = 1.d-9
  ekin_conv_thr    = 1.d-7
/
```

В разделе system указывается тип решетки Браве. Хотя для фосфорена известен тип решетки, указано значение параметра `ibrav = 0`, что означает, что эти сведения не используются, а сама моделируемая ячейка задается далее положением атомов. В этом же разделе указывается количество атомов в моделируемой ячейке (`nat = 16`).

```
&system
  ibrav            = 0
```

```

nat           = 16
ntyp         = 1
ecutwfc      = 60
ecutrho      = 360
nr1b         = 20
nr2b         = 20
nr3b         = 20

```

/

В проводимых расчетах будет учитываться только динамика электронов, динамикой ионов будем пренебрегать.

```

&ELECTRONS
electron_dynamics = 'damp',
electron_damping=0.1,
emass=300,
orthogonalization='ortho',
ortho_eps=1d-11,
ortho_max=1000

```

/

```

&IONS
ion_dynamics='none'

```

/

В коде ниже указывается ссылка на файл псевдопотенциала фосфора, а также позиции атомов, координаты векторов прямой решетки (в рассматриваемом случае определяются выбором элементарной ячейки моделирования).

```

ATOMIC_SPECIES
P 30.973762d0 P.pbe-nl-rrkjus_psl.1.0.0.UPF

```

```

ATOMIC_POSITIONS {angstrom}
P      1.64946  4.21132  13.3133
P      0.00000  2.72483  13.3133

```

```

P      1.64946  0.412741  11.2111
P      0.00000  1.89923  11.2111
P      1.64946  8.83537  13.3133
P      0.00000   7.34888  13.3133
P      1.64946  5.0368   11.2111
P      0.00000  6.52329  11.2111
P      4.94838  4.21132  13.3133
P      3.29892  2.72483  13.3133
P      4.94838  0.412741  11.2111
P      3.29892  1.89923  11.2111
P      4.94838  8.83537  13.3133
P      3.29892  7.34888  13.3133
P      4.94838  5.0368   11.2111
P      3.29892  6.52329  11.2111

```

CELL_PARAMETERS {angstrom}

```

6.59784  0.000000000  0.000000000
0.000000000  9.24811  0.000000000
0.000000000  0.000000000  20.0243944325025112

```

K_POINTS automatic

```
4 4 4 1 1 1
```

Запуск расчетов осуществляем командой:

```
mpirun -20 N ../../bin/pw.x -npool 20 < pscf.in > pscf.out
```

Собственно вычисление динамической матрицы задаем в файле pph.in.

```

&inputph
  prefix = 'phosphorene'
  epsil  = .false.,
  fildyn = 'phosphorene.dyn',
  ldisp  = .true.
  fildvscf = 'dvscf'
  nq1=2,

```

```

nq2=2,
nq3=2,
tr2_ph = 1.0d-12
/

```

Запуск расчетов осуществляется следующей командой:

```
mpirun -20 N ../../bin/ph.x -npool 20 < pph.in > pph.out
```

Теперь, имея частоты фононов и вариации самосогласованного потенциала, приступаем к выполнению обратного преобразования Фурье динамической матрицы. Чтобы получить обратные компоненты Фурье в реальном пространстве, используем программу q2r.x. Ниже приведен наш входной файл pq2r.in:

```

&INPUT
  fildyn = 'phosphorene.dyn'
  zasr = 'crystal'
  flfrc = 'phosphorene.fc'
/

```

Запускаем данный входной файл командой:

```
mpirun -np 20 q2r.x -i pq2r.in > pq2r.out
```

Наконец, выполним преобразование Фурье компонентов реального пространства, чтобы получить динамическую матрицу при любом q с помощью matdyn.x.

```

&INPUT
  asr = 'crystal'
  flfrc = 'phosphorene.fc'
  flfrq = 'phosphorene.freq'
  flvec = 'phosphorene.modes'
! loto_2d = .true.
  q_in_band_form = .true.
/

```

6

```
0.50000000 0.50000000 0.50000000 1 ! G
0.50000000 0.50000000 1.00000000 20 ! Z
0.50000000 1.00000000 1.00000000 20 ! T
0.50000000 1.00000000 0.50000000 20 ! Y
0.50000000 0.50000000 0.50000000 20 ! G
1.00000000 1.00000000 0.50000000 28 ! S
```

В этом файле указаны пути в пространстве волновых векторов между точками высокой симметрии. На рис. 1 показана первая зона Бриллюэна черного фосфорена и отмечено положение точек Γ , Z, T, Y, S, R, U, X. Запускаем входной файл:

```
mpirun -np 20 matdyn.x -i pmatdyn.in > pmatdyn.out
```

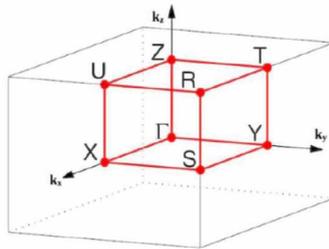


Рис. 1. Расположение точек высокой симметрии в первой зоне Бриллюэна черного фосфорена [10]

Далее вычисляем фононную плотность состояний, которая представляет гистограмму количества фононных состояний в частотном интервале. Пики и особенности в DOS показывают плотность колебательных мод на определенных частотах. Входной файл для расчета `pmatdyn.dos.in` приведен ниже.

```
&INPUT
asr   = 'crystal'
flfrc = 'phosphorene.fc'
flfrq = 'phosphorene.dos.freq'
flvec = 'phosphorene.dos.modes'
dos   = .true.
```

```
f1dos = 'phosphorene.dos'  
nk1   = 25  
nk2   = 25  
nk3   = 25
```

/

Запуск вычислений осуществляется следующим образом:

```
mpirun -np 20 matdyn.x -i pmatdyn.dos.in > pmatdyn.dos.out
```

На рис. 2 показан график плотности фоновых состояний. Распределение фоновых состояний сходно с графиками, представленными в работе [6], полученными на основе анализа экспериментальных данных.

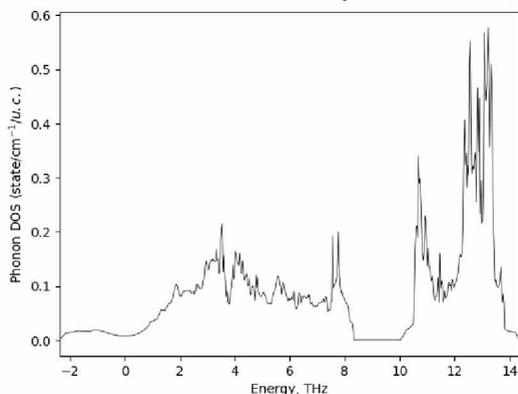


Рис. 2. График плотности фоновых состояний

Выводы

В рамках работы выполнено моделирование плотности фоновых состояний в черном фосфорене при помощи пакета EPW, входящего в пакет Quantum ESPRESSO. Полученные графики распределения плотности фоновых состояний коррелируют с графиками, полученными в ходе экспериментальных исследований [6].

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Li P., Appelbaum I. Electrons and holes in phosphorene // Phys. Rev. B. - V. 90. - P. 115439 (2014).
2. Lew Yan Voon L. C., Wang J., Zhang Y., Willatzen M. Band parameters of phosphorene // Journal of Physics: Conference Series. - V. 633. – P. 012042 (2015).

3. Luo Z., Maassen J., Deng Y., Du Y., Garrelts R.P., Lundstrom M.S., Ye P.D., Xu X. Anisotropic in-plane thermal conductivity observed in few-layer black phosphorus // Nature Communications. - V. 6. P. 8572 (2015).
4. Lew Yan Voon L.C., Lopez-Bezanilla A., Wang J., Zhang Y., Willatzen M. Effective Hamiltonians for phosphorene and silicone // New Journal of Physics. – V. 17. – P. 025004 (2015).
5. Zhou J., Liao B., Qiu B., Huberman S., Esfarjani K., Dresselhaus M.S., Chen G. Ab initio optimization of phonon drag effect for lower-temperature thermoelectric energy conversion // Proceedings of the National Academy of Sciences - V. 112 (48). – P. 14777-14782 (2015).
6. Pogna E.A.A., Bosak A., Chumakova A., Milman V., Winkler B., Viti L., Vitello M.S. Lattice dynamics and elastic properties of black phosphorus // Phys. Rev. B – V. 105. - P. 184306 (2022).
7. Qin G., Zhang X., Yue Sh.-Y., Qin Zh., Wang H., Han Y., Hu M. Resonant bonding driven giant phonon anharmonicity and low thermal conductivity of phosphorene // Phys. Rev. B – V. 94. – P. 165445 (2016).
8. Electron-phonon physics from first principles // EPW – URL: <https://epw-code.org/> (дата обращения: 15.06.2024).
9. Quantum ESPRESSO // Quantum ESPRESSO – URL: <https://www.quantum-espresso.org/> (дата обращения: 15.06.2024).
10. Pantha N., Chauhan B., Sharma P., Adhikari N. P. Tuning structural and electronic properties of phosphorene with vacancies // Journal of Nepal Physical Society. – V. 6. – Is. 1. – P. 7-15 (2020).

Конченков Владимир Игоревич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Электронно-вычислительные машины и системы» Волгоградского государственного технического университета, Россия, город Волгоград, проспект им. В.И. Ленина 28, 400005, телефон: +7 904 756 86 41, email: kontchenkov@yandex.ru;

Полянский Евгений Олегович, аспирант кафедры «Физика» Волгоградского государственного технического университета, Россия, город Волгоград, проспект им. В.И. Ленина 28, 400005, телефон: +7 919 799 92 98, email: irongame@yandex.ru.

Konchenkov Vladimir Igorevich, Associate Professor of the Department of Electronic Computing Machines and Systems, Volgograd State Technical University, 28 V.I.

Lenin Ave., Volgograd, Russia, 400005, phone: +7 904 756 86 41, e-mail: kontchenkov@yandex.ru

Polyanskiy Eugeni Olegovich, postgraduate student of the Department of Physics, Volgograd State Technical University, 28 V.I. Lenin Ave., Volgograd, Russia, 400005, phone: +7 919 799 92 98, email: irongamer@yandex.ru.