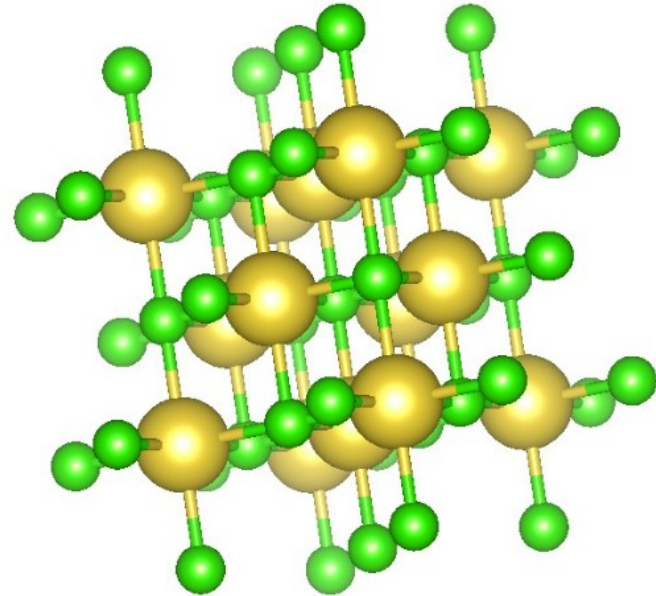
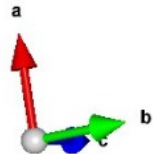


Vlastnosti kuchyňské soli (NaCl) počítané z prvních principů

Anežka Červinková
Jakub Vojtek

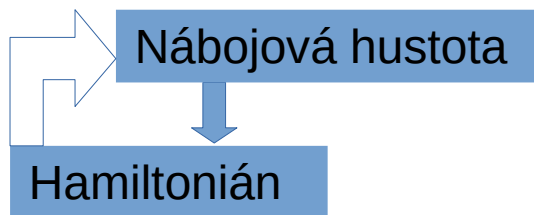


Metoda ab-initio

- Vlastnosti materiálů počítané z poloh jader
- Výpočet rozložení elektronů
- Schrödingerova rovnice: $\hat{H} \varphi_{n,k}(r) = E_{n,k} \varphi_{n,k}(r)$
- Teorie hustotního potenciálu: aproximace Hamiltoniánu nábojovou hustotou

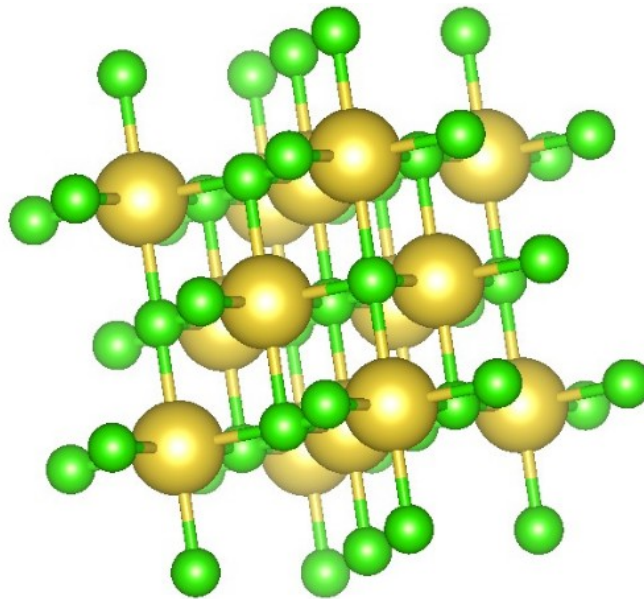
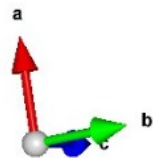
Numerické řešení

- Nábojová hustota zjišťována iterativně:



- Superpočítač Fakulty jaderné a fyzikálně inženýrské, kód WIEN2k
- Optimalizace: výpočet jen pro valenční elektrony, symetrie v krystalografické struktuře, zprůměrování spinů

Krystalografická mřížka NaCl



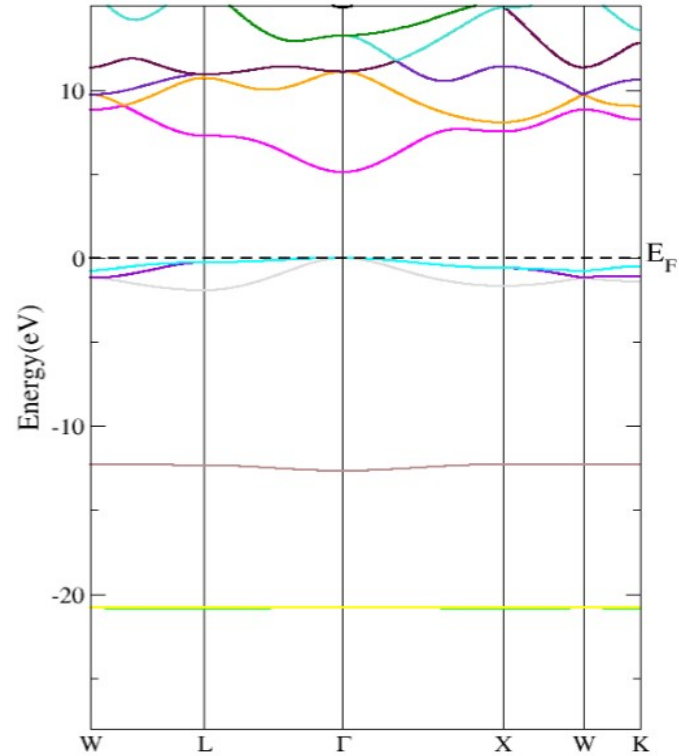
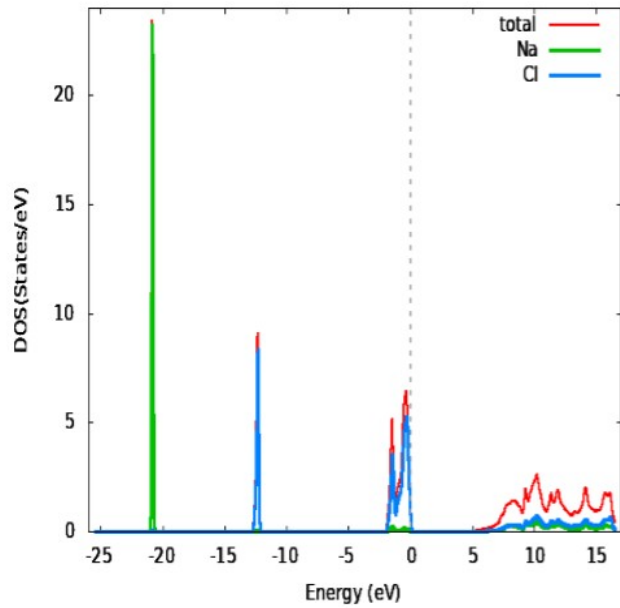
Elektronová struktura Na

| | | | | | | |
|-----|------------|------------|------|------|--------|---|
| 1S | -75.972835 | -75.972835 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 1S | -75.972835 | -75.972835 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 2S | -4.171082 | -4.171082 | 1.00 | 1.00 | 0.9990 | F |
| 2S | -4.171082 | -4.171082 | 1.00 | 1.00 | 0.9990 | F |
| 2P* | -2.115986 | -2.115986 | 1.00 | 1.00 | 0.9949 | F |
| 2P* | -2.115986 | -2.115986 | 1.00 | 1.00 | 0.9949 | F |
| 2P | -2.102843 | -2.102843 | 2.00 | 2.00 | 0.9947 | F |
| 2P | -2.102843 | -2.102843 | 2.00 | 2.00 | 0.9947 | F |
| 3S | -0.201692 | -0.201692 | 0.50 | 0.50 | 0.1609 | F |
| 3S | -0.201692 | -0.201692 | 0.50 | 0.50 | 0.1609 | F |

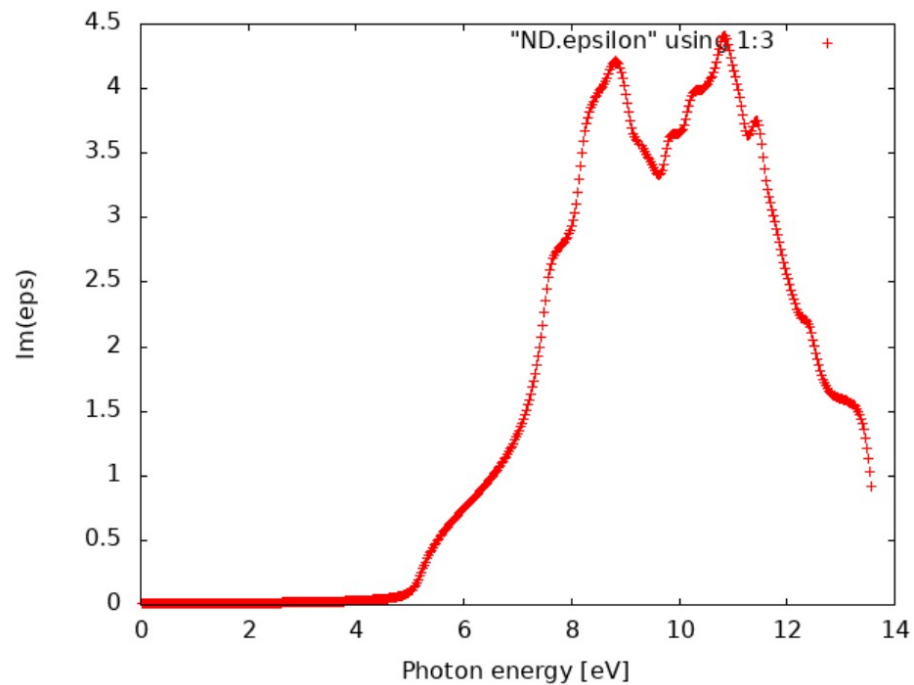
Elektronová struktura Cl

| | | | | | | |
|-----|-------------|-------------|------|------|--------|---|
| 1S | -202.194453 | -202.194453 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 1S | -202.194453 | -202.194453 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 2S | -18.569317 | -18.569317 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 2S | -18.569317 | -18.569317 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 2P* | -14.163986 | -14.163986 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 2P* | -14.163986 | -14.163986 | 1.00 | 1.00 | 1.0000 | T |
| 2P | -14.039264 | -14.039264 | 2.00 | 2.00 | 1.0000 | T |
| 2P | -14.039264 | -14.039264 | 2.00 | 2.00 | 1.0000 | T |
| 3S | -1.520193 | -1.520193 | 1.00 | 1.00 | 0.9294 | F |
| 3S | -1.520193 | -1.520193 | 1.00 | 1.00 | 0.9294 | F |
| 3P* | -0.637316 | -0.637316 | 1.00 | 1.00 | 0.8192 | F |
| 3P* | -0.637316 | -0.637316 | 1.00 | 1.00 | 0.8192 | F |
| 3P | -0.628219 | -0.628219 | 1.50 | 1.50 | 0.8156 | F |
| 3P | -0.628219 | -0.628219 | 1.50 | 1.50 | 0.8156 | F |

Elektronová struktura NaCl



Optické vlastnosti NaCl



Shrnutí

- Seznámení se s metodou ab-initio
- Vizualizace krystalografické mřížky NaCl
- Výpočet elektronové struktury pro Na a Cl
- Výpočet elektronové struktury NaCl
- Výpočet optických vlastností NaCl

Děkujeme Vám za pozornost