

Bandstrukturmethoden Demo 4: NiMnSb-Kristall

Bandstrukturrechnung mittels FP-LAPW WIEN2k-02

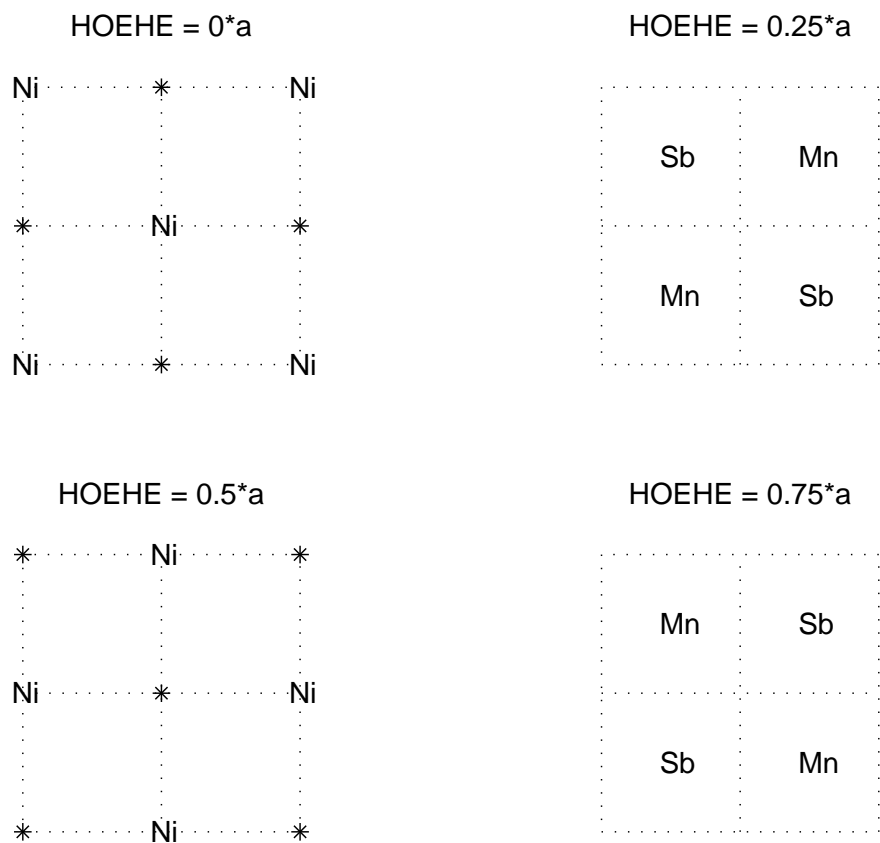
- Kristallstruktur von NiMnSb → **half-Heusler**
- Input für das WIEN-Programm
- Vorbereitung der Bandstrukturrechnung (mit weiteren wichtigen Parametern).
- Die spin-polarisierte Bandstrukturrechnung
- Ergebnisse

Bandstrukturmethoden Demo 4: NiMnSb-Kristall

Bandstrukturrechnung mittels FP-LAPW WIEN2k-02

- Kristallstruktur von NiMnSb → **half-Heusler**
- Input für das WIEN-Program
- Vorbereitung der Bandstrukturrechnung (mit weiteren wichtigen Parametern).
- Die spin-polarisierte Bandstrukturrechnung
- Ergebnisse

Die "half-Heusler" Bandstruktur:



* = Leerstelle

• Input-File für WIEN: NiMnSb_demo.struct

NiMnSb

F LATTICE,NONEQUIV. ATOMS: 3

MODE OF CALC=RELA

11.187000 11.187000 11.187000 90.000000 90.000000 90.000000

Atom= 1: X=0.00000000 Y=0.00000000 Z=0.00000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Ni NPT= 781 R0=0.00050000 RMT= 2.4000 Z: 28.0
1.000000000.000000000.000000000
0.000000001.000000000.000000000
0.000000000.000000001.000000000

Atom= 2: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.25000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Mn NPT= 781 R0=0.00050000 RMT= 2.4000 Z: 25.0
1.000000000.000000000.000000000
0.000000001.000000000.000000000
0.000000000.000000001.000000000

Atom= 3: X=0.25000000 Y=0.25000000 Z=0.75000000

MULT= 1 ISPLIT= 2

Sb NPT= 781 R0=0.00050000 RMT= 2.4000 Z: 51.0
1.000000000.000000000.000000000
0.000000001.000000000.000000000
0.000000000.000000001.000000000

0 SYMMETRY OPERATIONS:

Elektronenstruktur Nickel Ni (Z=28):



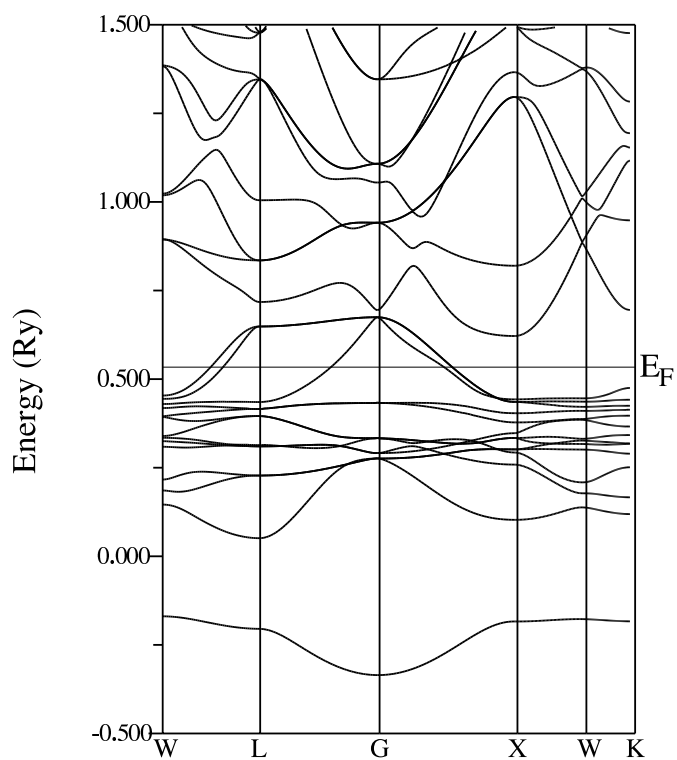
Elektronenstruktur Mangan Mn (Z=25):



Elektronenstruktur Antimon Sb (Z=51):

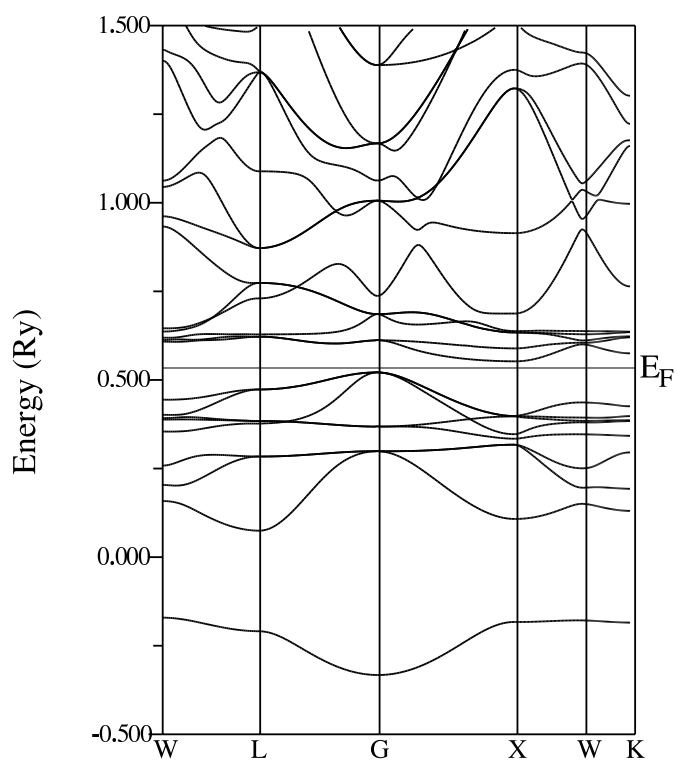


NiMnSb_demo atom 0 size 0.20



NiMnSb-Bandstruktur: Spin UP

NiMnSb_demo atom 0 size 0.20



NiMnSb-Bandstruktur: Spin DOWN