

LAPW0

برنامه LAPW0 پتانسیل کلمبی $V_{coul} = V_{Ne} + V_{ee}$ ، پتانسیل تبادلی همبستگی V_{XC} و پتانسیل کل $V_{tot} = V_{coul} + V_{XC}$ بکار رفته در معادله کوهن-شم $(-\nabla^2 + V_{Ne} + V_{ee} + V_{XC})\chi_{ik}^\sigma(r) = \varepsilon_{ik}^\sigma \chi_{ik}^\sigma(r)$ را محاسبه می کند.

ورودی این برنامه case.struct، case.in0 و case.clmsum و خروجیهای آن case.output0، case.scf0، case.vsp و case.vns اند. خروجیهای case.vsp و case.vns که با استفاده از ورودی case.clmsum به عنوان چگالی الکترونی به دست می آیند حاوی به ترتیب بخش کروی پتانسیل $V_{L=0,M=0}(r)$ و بخشهای غیر کروی پتانسیل $V_{L\neq 0,M}(r)$ در نمایش کاهش ناپذیر هماهنگهای شبکه می باشند. نوع تقریب بکار رفته برای پتانسیل تبادلی همبستگی توسط برنامه init_lapw سوال می شود و پاسخ آن به صورت یک عدد در case.in0 به عنوان ورودی برنامه LAPW0 نوشته می شود. این عدد که در فایل case.in0 زیر 13 انتخاب شده است:

```

TOT      13
MULT/COUL/EXCH/POT /TOT ;  VXC-SWITCH
NR2V      (R2V / NR2V)      (#Exchange-
correlation (case.r2v), Coulomb and
total

                                potentials
) to a  $r^2V$  (case.vcoul) are written as (
                                file for
plotting with lapw5)
0 0.0      (#of FK in E-field
expansion, EFELD (Ry)
0          (list of K-vectors)

```

می تواند هر یک از اعداد متعارفتر زیر:

1 Moruzzi, Janak, Williams(78)

5 Perdew and Wang 92, reparameterization of Ceperly-Alder data, the recommended LDA option

13 Generalized Gradient approximation (Perdew-Bourke-Ernzerhof 96)

14 Generalized Gradient approximation (Perdew-Wang 91)

12 Meta GGA (Perdew et al. 2000).

و یا اعداد دیگر ارایه شده در جدول انواع پتانسیلهای موجود در کد WIEN2k (به بخش آماده سازی مراجعه فرمایید) باشد. توصیف خط دوم در ورودی گنجانده شده است. دو خط آخر ورودی case.in0 اختیاری بوده و می تواند حذف شود. این دو خط آخر برای معرفی میدان الکتریکی از طریق یک پتانسیل زیگ زاکی بکار برده می شوند. برای به کار بردن تقریب Meta-GGA لازم است مراحل زیر انجام شود:

الف) حداقل یک چرخه از مرحله حل خودسازگار با تقریب GGA یعنی استفاده از عدد 13 در case.in0 اجرا شود، و سپس تغییر عدد 13 به عدد 12 به منظور استفاده از تقریب Meta-GGA.

ب) ساختن فایل case.inm_vresp. ساختار این فایل و فایل case.inm یکسان است. بنابراین کافی است یک نسخه اضافی از فایل case.inm به نام case.inm_vresp تهیه شود (cp case.inm case.inm_vresp)

ج) استفاده از چگالیهای بار غیر نرمالیزه. این کار با قرار دادن norm=NO در فایل case.inm_vresp انجام می شود.

د) افزایش انرژی قطع در بسط پتانسیل بر حسب امواج تخت خارج از کرات موافین-تین در فایل case.in2 از 14 به 24.9

($G_{max}=24.9$). در پایان اجرای مرحله حل خود سازگار تا حصول همگرایی مطلوب.

در تقریب Meta-GGA پتانسیل تبادلی همبستگی نظریه تابعی چگالی از برآزش تقریب GGA که در آن تغییرات پتانسیل تبادلی همبستگی به آرامی صورت می گیرد به دست می آید. در تقریبهای شیب تعمیم یافته (GGA) فقط چگالی موضعی و مشتق اول آن به عنوان ورودی مورد نیاز است، در حالی که در تقریب ماورا GGA یا همان (Meta GGA) چگالی انرژی جنبشی اربیتال نیز مورد نیاز است، که به همین دلیل باید از حد بالای G_{max} استفاده شود. مولفه انرژی تبادلی تقریب ماورا GGA با دقت زیادی از مرتبه چهار تخمین زده می شود، در حالی که هنوز خطای ناشی از خود-برهمکنش الکترونها در مولفه انرژی همبستگی تقریب ماورا GGA وجود دارد. پیامدهای این تقریب عبارتند از:

الف) بهبود چشم گیر انرژیهای اتمی سازی مولکولی و انرژیهای سطحی فلزات.

ب) تغییر اندک در ثابتهای شبکه.

پتانسیل V_{coul} درون کرات مستقیماً به روش گرین به طور کلاسیکی با اعمال شرایط مرزی محاسبه می شود. پتانسیل V_{coul} در ناحیه خارج

از کرات از طریق بسط فوریه چند قطبی چگالی محاسبه می شود. چگالی در ناحیه خارج از کرات به راحتی به صورت سری فوریه بسط داده می شود زیرا در این ناحیه چگالی بر حسب امواج تخت بسط داده شده است. مقدار این سری فوریه چگالی فقط در ناحیه خارج از کرات قابل قبول است یعنی مقادیر آن در درون کرات غلط می باشند. پس در درون کرات دو نوع ممان چند قطبی وجود دارد: یکی ممان چند قطبی صحیح درون کرات Q_{SP} و دیگری ممان چند قطبی ناصحیح Q_{PW} خارج از کرات (امتداد یافته به درون کرات) یعنی جائی که چگالی بر حسب امواج تخت بسط داده می شود. برای رفع این نقیصه کافی است که ابتدا ممان تفاضلی یا شبه ممان زیر را تعریف کنیم:

$$Q_{diff}=Q_{SP}-Q_{PW}$$

سپس یک چگالی بر حسب امواج-تخت به گونه ای بسط داده شود که ممان تفاضلی فوق را تولید کند، مشروط بر آن که مقدار آن در ناحیه خارج از کرات صفر باشد. اگر این سری جدید از چگالی با دو شرط فوق به سری نخست در ناحیه خارج از کرات اضافه شود،

**آنگاه: الف) یک بسط صحیح از بار خارج از کرات خواهیم داشت،
ب) ممانهای بار چند قطبی درون نمام کرات تولید می شوند.
بنابراین پتانسیل کلمبی ناحیه های خارج و درون کرات قابل
محاسبه می شوند. گرادیان میدان الکتریکی (EFG) نیز در
نزدیکی مکانهایی از هسته ها ($< 0.2\text{\AA}$) با تقارن غیر مکعبی در برنامه
LAPW0 قابل محاسبه است.**