

LAPW1

برنامه LAPW1 هامیلتونی دستگاه و ماتریس روی هم افتاگی را تشکیل می دهد و با قطری سازی مقادیر ویژه و بردارهای ویژه را محاسبه می کند. علاوه بر روش استاندارد LAPW می توان از روش APW+lo نیز در نسخه اخیر استفاده کرد. برای ساختارهایی که از تقارن وارون برخوردار نیستند، که در آنها عناصر ماتریس هامیلتونی و روی هم افتادگی اعداد موهومی اند، از نسخه موهومی این برنامه LAPW1C باید استفاده کرد (x lapw1 -c -up/dn). زمان اجرای برنامه LAPW1 به ابعاد ماتریس هامیلتونی بستگی دارد، که در صورت استفاده از تعداد k -های زیاد از زمان اجرای بقیه برنامه ها به مراتب بیشتر است. برای رفع این نقیصه تقسیم تعداد k -ها بین کامپیوترهای مختلف پیش بینی شده است، که به راحتی قابل استفاده است (x lapw1 -p -c -up/dn). علاوه بر این در نسخه جدید روتینهای استاندارد LAPCK نیز بهینه شده اند، که به آنها روتینها قطری سازی کامل گفته می شود. در عمل قطری سازی به طور کامل انجام نمی شود. عمل قطری سازی به صورت تدریجی و مرحله به مرحله با استفاده

از روش block-Davidson انجام می شود. این روش اگرچه تقریبی است ولی از روش استاندارد (تصحیح نشده) LAPCK سریعتر است به ویژه در مواردی که ابعاد ماتریس هامیلتونی بزرگ باشد. اشکال این روش این است که به حافظه (RAM) بیشتری نیاز دارد زیرا در این روش اطلاعات مرحله قبل (بردارهای ویژه تولید شده در مرحله حل خودسازگار قبل) برای محاسبه بردارهای ویژه جدید مورد نیازاند. بنابراین بردارهای ویژه مرحله قبل و مرحله جدید به طور همزمان باید قابل دسترسی باشند، که این امر حافظه RAM بیشتری را طلب می کند.

ورودی این برنامه case.struct، case.in1 و case.vsp و خروجیهای آن case.output1، case.scf1، case.vector و case.energy است. این برنامه ورودی case.vnsp را نیز می پذیرد که قبلاً در توصیف برنامه LAPW0 به آن پرداخته شده است. در صورت وجود case.vnsp حل با پتانسیل کامل انجام می شود. ورودی case.in1 در صورت عدم وجود تقارن وارون باید به case.in1c تبدیل شود (mv case.in1 case.in1c). ورودی case.in1 برای مثال TiO_2 می تواند به صورت زیر باشد:

```

WFFIL          (WFPRI,WFFIL,SUPWF ; wave
fct. print,file,suppress
  7.500      10      4  (R-mt*K-max; MAX 1,
max 1 for hns )
  0.30      5 0 (global energy parameter
E(1), with 5 other choices, LAPW)
  0      -3.00      0.020 CONT 0 ENERGY
PARAMETER for s, LAPW+LO
  0      0.30      0.000 CONT 0 ENERGY
PARAMETER for s-local orbital, LAPW-LO
  1      -1.90      0.020 CONT 0 ENERGY
PARAMETER for p LAPW+LO
  1      0.30      0.000 CONT 0 ENERGY
PARAMETER for p-local orbitals LAPW-LO
  2      0.20      0.020 CONT 1
APW-lo
  0.20      3 0 (global energy parameter
E(1), with 1 other choice, LAPW)
  0      -0.90      0.020 STOP 0
LAPW+LO
  0      0.30      0.000 CONT 0
LAPW-LO
  1      0.30      0.000 CONT 1
APW-lo
K-VECTORS FROM UNIT:4      -9.0      1.5
IUNIT, Emin, Emax

```

که در آن $R\text{-}mt * K_{\text{max}} = 7.5$ پارامتری است که سرعت و دقت اجرای برنامه را تعیین می کند. $R\text{-}mt$ کوچکترین شعاع کره موافقین-تین است. K_{max} بیشینه اندازه بردار موج در بسط توابع موج خارج از کرات بر حسب امواج تخت است. در بسط توابع موج بر حسب امواج تخت، K_{max}^2 انرژی قطع بر حسب Ry را تعیین می کند. این پارامتر را با RK_{max} نیز نمایش می دهند. مقدار معمول آن در روش $APW+lo$ در بازه $[5, 9]$ و در روش $LAPW+LO$ در بازه $[6, 10]$ بر حسب $bohr \times \sqrt{Ry}$ بسته به میزان دقت محاسبات متغیر است. زمان اجرای برنامه $LAPW1$ و دقت محاسبات با افزایش این پارامتر افزایش می یابد. افزایش این پارامتر معادل با افزایش انرژی قطع است. دقت نسبی قابل قبول در روش $LAPW$ که با $RK_{\text{max}} = 8$ حاصل می شود، تقریباً متناظر و قابل مقایسه با دقت حاصل از 7 یا $RK_{\text{max}} = 6.5$ در روش $APW+lo$ است. این بدان معنی است که سرعت اجرا در روش $APW+lo$ تقریباً ده برابر بیشتر از روش $LAPW+LO$ است.

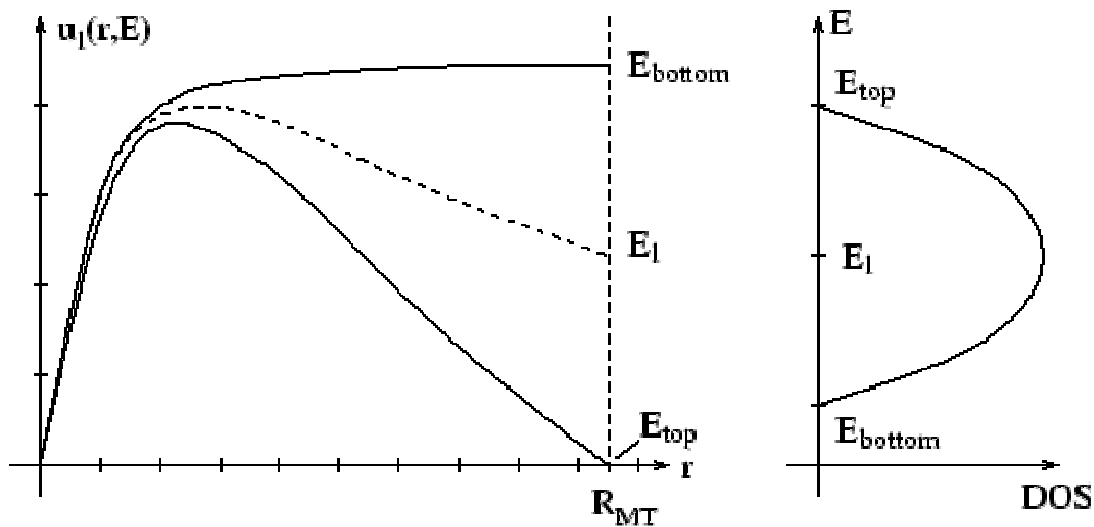
عدد صفر (ستون آخر) در خط 0.30 1

0 CONT 0.000 از ورودی case.in1 فوق معرف استفاده از

روش LAPW است. قرار دادن عدد یک به جای این عدد صفر معرف استفاده از روش APW است. عدد یک (ستون اول) از این خط عدد کوانتومی $l=1$ را نشان می دهد و در واقع به اربیتال d اشاره می کند. ستون دوم به الکترونهاي اربیتال d اتم غير يکسان اول انرژی میانگین اتمی $E_{l=1}=0.3 \text{ Ry}$ را نسبت می دهد. این بدان معنی است که توقع داریم انرژی الکترونهاي اربیتال d در بلور تقریباً حول این مقدار میانگین توزیع شوند. انتخاب انرژی میانگین $E_{l=1}=0.3 \text{ Ry}$ برای دستگاه هایی که سطح فرمی آنها کمتر از 0.5 Ry باشد مناسب است. برای دستگاه هایی با انرژیهای فرمی بزرگتر (آکتانیدهای سنگین) انرژی میانگین فوق می تواند افزایش یابد. در چنین مواردی به جای افزایش تک تک انرژیهای اربیتالهای ظرفیت اتمهای مختلف راحتتر آن است که در خط زیر (خط سوم از case.in1)

0.30 5 0 (global energy parameter
 $E(1)$, with 5 other choices, LAPW)

عدد 0.3 در ستون اول یعنی پارامتر انرژی سراسری را افزایش دهیم. اما در هر صورت بهتر آن است که خطی سازی انرژی همواره تحقیق شود. خطی سازی انرژی یعنی یافتن انرژی میانگین E_l ، مناسب هر اربیتال برای هر اتم غیر یکسان. به عبارت دیگر خطی سازی انرژی عبارت است از یافتن میانگین حسابی $\frac{E_{top} + E_{bottom}}{2}$ به ازای هر l از هر اتم مطابق شکل 5-1:



نحوه تغییرات پاسخ معادله شعاعی شرودینگر $u_l(r, E)$ بر حسب r در شکل سمت چپ 5-1 نمایش داده شده است. انرژی E_{top} از معادله

$$u_l(r, E) \Big|_{r=R_{MT}} = 0 \quad \text{و انرژی } E_{bottom} \text{ از معادله } \frac{\partial u_l(r, E)}{\partial r} \Big|_{r=R_{MT}} = 0 \quad \text{به دست می آید}$$

آیند. به روش عددی گاهی این انرژیها قابل حصول نیستند، که در این شرایط خطی سازی بارسم چگالی حالت مورد نظر باید انجام شود. برای این منظور کافی است که چگالی حالت مورد نظر رسم و به طور میانگین و سط منحنی DOS جایی (آن انرژی) که احتمال حضور الکترون در آن بیشتر است اختیار شود. توصیه می شود که خطی سازی به صورت ساده با اضافه کردن کلید، `-in1new 2`، به برنامه `(runsp_lapw run_lapw)` به صورت

```
run_lapw -in1new 2 (runsp_lapw -in1new
```

(2) انجام و سپس فقط صحت آن تحقیق شود. خط آخر ورودی

`case.in1` به صورت زیر است:

```
K-VECTORS FROM UNIT:4      -9.0      1.5
IUNIT, Emin, Emax
```

که در آن بازه $[E_{\min}=-9.0, E_{\max}=1.5]$ پنجره ای را از انرژی بر حسب ریدبرگ بر روی تمام محاسبات می گشاید. این بدان معنی است که کلیه محاسبات فقط در این بازه از انرژی انجام می شود. بین انرژی جداسازی (S.E.) و انرژی $E_{\min}$ رابطه $E_{\min}=S.E. -1$ وجود دارد. افزایش انرژی $E_{\max}$ در محاسبات نسبیتی عددی یا

اسکالری نقش به سزایی در افزایش دقت محاسبات دارد. افزایش انرژی $E_{\max}$ تا حصول همگرایی مطلوب در انرژی کل دستگاه جایی که نقش بر همکنش اسپین-مدار مهم است (مثلا در آکتانیدها) ضروری است. در این پنجره انرژی در ناحیه شبه مغزه حالتی وجود دارند که برای بررسی آنها باید از اربیتالهای موضعی (local orbitals) استفاده گردد. این اربیتالهای موضعی با LO در روش LAPW نمایش داده می شوند و به آن روش LAPW+LO می گویند. در روش APW اربیتالهای موضعی با lo نمایش داده می شوند که در صورت استفاده از این اربیتالها به روش محاسبه روش APW+lo گفته می شود. برای هر اربیتال می توان در ورودی case.in1 دو پایه یکی در ناحیه ظرفیت و دیگری در ناحیه شبه مغزه تعریف کرد. مثلا سه خط زیر از ورودی case.in1 را در نظر بگیرید:

```

1      -1.90      0.020 CONT 0      ENERGY
PARAMETER for p      LAPW+LO
1      0.30      0.000 CONT 0      ENERGY
PARAMETER for p-local orbitals LAPW-LO
2      0.20      0.020 CONT 1
APW-lo

```


خطوط دوم و سوم دو پایه در ناحیه ظرفیت را به ترتیب برای اربیتالهای p و d نمایش می دهند. خط اول یک پایه در ناحیه شبه مغزه را برای اربیتال p نمایش می دهد. به این پایه اربیتال موضعی گفته می شود. بنابراین در این مثال از روش LAPW+LO استفاده شده است. در این مثال از روش APW+lo استفاده نشده است، زیرا برای پایه APW اربیتال موضعی تولید نکرده ایم، که البته این کار را نیز می توان انجام داد. لفظ موضعی در اینجا به کوچک بودن بازه انرژی جایی که چگال حالت در ناحیه شبه مغزه تشکیل می شود اشاره دارد. چگالی حالتها در نواحی نیمه مغزه تیز یا موضعی هستند.