

LAPW2

برنامه LAPW2 از مقادیر ویژه (case.vector) محاسبه شده در برنامه LAPW1 و یا از مقادیر ویژه (case.vectorso) محاسبه شده در برنامه LAPWSO استفاده می کند. برنامه LAPW2 با استفاده از این مقادیر ویژه انرژی فرمی و بسطهای چگالیهایی بارالکترونی به صورت زیر

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{L,M} \rho_{LM}(\vec{r}) Y_{LM} & ; \vec{r} \in S \\ \sum_{\vec{K}} V(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} & ; \vec{r} \in I \end{cases}$$

را برای هر حالت اشغال شده درون کرات (S) و هر بردار موج $\vec{K}$ برون کرات (I) محاسبه می کند. سپس بارهای جزئی (نواحی ظرفیت و شبه مغزه) درون کرات و بار خارج کرات با انتگرالگیری محاسبه می شوند. ورودی این برنامه case.struct، case.vector، case.vsp و case.energy و خروجیهای آن case.clmsc، case.clmval، case.scf2، case.output2، case.help3* و case.qtl (جدول 2-5) اند. بارهای جزئی برای

هر حالت (ویژه مقدار انرژی) و هر بردار $\vec{k}$ را می توان در خروجیهای case.help31, case.help32 و غیره یافت، که در آنها عدهای آخر (مثلا 1 یا 2 در اینجا) به شاخص اتمی اتمهای غیر یکسان اشاره دارند. این برنامه همچنین تصحیح نیروی پاولی را محاسبه می کند و آن را به نیروهای قبلا محاسبه شده در مکان هسته ها (بدون در نظر گرفتن تصحیح پاولی) اضافه می کند. اگر یک دستگاه فاقد تقارن وارون باشد باید برنامه LAPW2C اجرا شود (x lapw2 -c). برنامه run(sp)_c_lapw ، برنامه LAPW2C را فراخوانی می کند، اگر ورودی case.in2c وجود داشته باشد. اگر یک دستگاه حاوی تقارن وارون هم باشد، گاهی لازم است که LAPW2C اجرا شود. بردارهای ویژه (case.vectorso) حاصل از برنامه LAPWSO حتی در غیاب قطبیدگی اسپینی همیشه اعداد موهومی اند. بنابراین در حضور برهمکنش اسپین-مدار باید برنامه LAPW2C اجرا شود، حتی اگر دستگاه دارای تقارن وارون باشد. اما اگر دستگاه دارای تقارن وارون باشد کافی است که برنامه LAPW1 اجرا شود. یکی از مزایای استفاده از برنامه initso_lapw این است که خود ورودی case.in2c را تولید می کند. اگر بخواهیم محاسبات را فقط به

الکترونیهای ناحیه شبه مغزه معطوف کنیم کافی است که از برنامه LAPW2S استفاده کنیم. ورودی اصلی برنامه LAPW2S عبارت است از case.in2s. چگالیهای بار (ناحیه شبه مغزه) در صورت استفاده از برنامه LAPW2S در case.clmsc به جای case.clmval ذخیره می شوند. یک نمونه از ورودی اصلی (case.in2) برنامه LAPW2 به صورت زیر است:

```
TOT
(TOT, FOR, QTL, EFG)
-9.0          32.000      0.5   0.05   (EMIN,
# of electrons, ESEPERMIN, ESEPER0 )
TETRA          0.0          (EF-method
(ROOT, TEMP, GAUSS, TETRA, ALL), value)
  0  0  2  0  2  2  4  0  4  2  4  4
  0  0  1  0  2  0  2  2  3  0  3  2  4  0  4  2  4  4
14.0          (GMAX)
FILE          (NOFILE, optional)
```

پارامتر $G_{\max}$ انرژی قطع بر حسب $(Ry)^{1/2}$ برای بسط پتانسیل و چگالی (و نه توابع موج) را در ناحیه خارج از کرات موافق-تین تعیین می کند. حد پایین این پارامتر 9 و حد بالای آن 25 است

($9.0 \leq G_{\max} \leq 25.0$). اگرچه 14 عدد مناسبی برای این پارامتر در موارد متعددی به شمار می رود، ولی تحقیق همگرایی پارامترهای مورد نظر با افزایش این پارامتر ضروری است. شاخصی به نام $g_{\min}$ در خروجی case.outputd برنامه LSTART وجود دارد، که کوچکتر بودن آن از انرژی قطع ضروری است $G_{\max} > g_{\min}$. گاهی شرط $G_{\max} > g_{\min}$ برآورده نمی شود، که برشمردن علت‌های آن می تواند در رفع مشکل کمک کند.:

الف) کوچک بودن شعاع کره موفین – موفین، که در اتم‌های خیلی سبک ضروری است.

ب) بزرگ بودن پارامتر $RK_{\max}$.

ج) کوچک بودن پارامتر $G_{\max}$.

بهترین راه حل افزایش افزایش خود پارامتر $G_{\max}$ است. ولی پارامتر $G_{\max}$ دارای یک حد بالاست. پس از انتخاب بزرگترین پارامتر $G_{\max}$ راه دوم کاهش پارامتر $RK_{\max}$ است. ولی کاهش پارامتر $RK_{\max}$ دقت محاسبات را کاهش می دهد. در این صورت با افزایش شعاع کره موفین – تین اتم سبک باید دو پارامتر $G_{\max}$ و $RK_{\max}$ بهینه شوند.

دنباله 0 0 2 0 2 2 4 0 4 2 4 4 ترکیبات مختلف

LM در بسط پتانسیل و چگالی را برای اتم غیر یکسان اول نشان می

دهد. دنباله 0 0 1 0 2 0 2 2 3 0 3 2 4 0 4

2 4 4 ترکیبات مختلف LM در بسط پتانسیل و چگالی را برای

اتم غیر یکسان دوم نشان می دهد. در این مثال حد بالای $L=4$

اختیار شده است. ترکیبات LM اتم اول با اتم دوم تفاوت دارد. علت

این تفاوت آن است که گروه نقطه ای اتم اول با گروه نقطه ای اتم

دوم تفاوت دارد. تعداد ترکیبات LM اتم اول کمتر از تعداد ترکیبات

LM اتم دوم است. کمتر بودن تعداد ترکیبات LM اتم اول گویای آن

است که تعداد عناصر تقارنی گروه نقطه ای اتم اول بیشتر از تعداد

عناصر تقارنی گروه نقطه ای اتم دوم است. تعداد ترکیبات LM در

کمترین تقارن برای $L=4$ به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$\sum_{L=0}^4 (2L+1) = 1+3+5+7+9 = 25$$

ذکر این نکته مفید است که یک حد بالا برای تعداد ترکیبات در

برنامه وجود دارد. این حد بالا با پارامتر NCOM قابل تغییر است.

پارامتر NCOM به صورت زیر تعریف می شود:

$$NCOM + 3 > n_{L,M=0} + 2n_{L,M>0} = n_{L,M=0} + n_{L,M \neq 0}$$

که در آن n تعداد ترکیبات LM را نشان می دهد و $NCOM=91$ در برنامه وین اختیار شده است. برنامه SYMMETRY گروههای نقطه ای هریک از نقاط شبکه، عملگرهای تقارنی متناظر با هر گروه نقطه ای، و مقادیر LM نمایش هماهنگهای شبکه را بر اساس نوع شبکه و موقعیتهای اتمی داده شده تعیین می کند. ترکیبات LM گروه مکبی در جدول زیر آورده شده است.

جدول 5-3: ترکیبات LM گروه مکبی.

تقارن	ترکیبات LM
23	0 0, 4 0, 4 4, 6 0, 6 4,-3 2, 6 2, 6 6,-7 2,-7 6, 8 0, 8 4, 8 8,-9 2,-9 6,-9 4,-9 8,10 0, 10 4,10 8, 10 2, 10 6, 10 10
M3	0 0, 4 0, 4 4, 6 0, 6 4, 6 2, 6 6, 8 0, 8 4, 8 8,10 0, 10 4,10 8, 10 2, 10 6, 10 10
432	0 0, 4 0, 4 4, 6 0, 6 4, 8 0, 8 4, 8 8,-9 4,-9 8,10 0, 10 4,10 8

-43M	0 0, 4 0, 4 4, 6 0, 6 4,-3 2,-7 2,-7 6, 8 0, 8 4, 8 8,-9 2,-9 6,10 0, 10 4,10 8
M3M	0 0, 4 0, 4 4, 6 0, 6 4, 8 0, 8 4, 8 8,10 0, 10 4,10 8

جدول ترکیبات گروه های غیر مکعبی در کتابچه وین وجود دارد. توصیه می شود که از ورودی case.in2 تولید شده توسط خود برنامه (بدون اعمال تغییر) استفاده شود. تغییرات در خطوط 1، 2 و 3 با هدف معین بهتر است پس از پایان حل خودسازگار انجام شود. مثلاً تغییر TOT در خط اول case.in2 به FOR برای اضافه کردن نیروی پاولی به نیروهای قبلاً محاسبه شده در ابتدای حل خودسازگار جز اتلاف وقت منفعت بیشتری ندارد. در نظر گرفتن نیروی پاولی بدون اتلاف وقت امکان پذیر است، اگر پس از حصول همگرایی مطلوب با کلید TOT فقط یک چرخه با کلید FOR انجام شود. کلیدهای EFG (گرادیان میدان الکتریکی) و QTL (بارهای جزیی) خاصتر هستند، به این معنی که پس از حصول همگرایی مطلوب با کلید TOT فقط اجرای برنامه LAPW2 با کلید EFG یا QTL لازم است. تغییر تعداد الکترونها و الانس در

خط دوم فقط در صورت استفاده از روش مغزه باز (open core) معنی دارد. تغییر انرژی Emin در خط دوم فقط در صورت علاقه مند بودن به الکترونهای یک ناحیه خاص اهمیت دارد. مثلاً محاسبه گرادیان میدان الکتریکی ناشی از الکترونهای ظرفیت با تغییر Emin از 9.0- به 1.0- و تغییر کلید TOT به EFG و سپس فقط اجرای برنامه LAPW2 انجام می شود. به این ترتیب گرادیان میدان الکتریکی الکترونهای شبه مغزه از کم کردن گرادیان میدان الکتریکی الکترونهای ظرفیت از گرادیان میدان الکتریکی کل به راحتی قابل حصول است. آنالیز گرادیان میدان الکتریکی در مثال bct-In و تأثیر Emin بر مقادیر محاسبه شده گرادیان میدان انجام شده است:

http://www.wien2k.at/reg_user/faq/efg.pdf