

LAPWDM

برنامه LAPWDM ماتریس چگالی برای پتانسیلهای وابسته به اربیتال (پتانسیلهای اربیتالی) را تولید می کند. برنامه ORB پتانسیلهای اربیتالی را با استفاده از ماتریسهای چگالی محاسبه می کند. از طرفی برنامه ORB قبل از برنامه LAPWDM اجرا می شود. بنابراین در چرخه نخست از یک حل خودسازگار ماتریس چگالی هنوز تولید نشده است. برای رفع این مشکل کافی است که ماتریسهای چگالی قبل از شروع حل خود سازگار با جرای x lapwdm (-up/dn) تولید شوند. در چرخه های بعدی ماتریس چگالی تا حصول همگرایی مطلوب باز تولید می شوند. این برنامه می تواند ممانهای مداری، سهمهای مداری و دو قطبی در میدان فوق ریز را نیز به دست دهد. این برنامه مقدار میانگین عملگر X را نیز می تواند محاسبه کند. عملگر X فقط باید در درون کرات غیر صفر باشد که می تواند به صورت $X = X_r(r)X_{ls}(\bar{l}, \bar{s})$ متغیرهای زاویه ای و شعاعی آن از هم جدا شوند. ورودیهای این برنامه case.struct، case.indm، case.vsp، case.vector(so)، case.energy و case.weight و خروجیهای آن

case.dmat، case.scfdm، case.outputdm اند. خروجی case.dmat حاوی ماتریسهای چگالی است (این خروجی ورودی برنامه ORB است!). جمع عناصر روی قطر ماتریس چگالی تعداد الکترونهاي موجود در اربیتال (به طور قوی همبسته) را نشان می دهد. یک نمونه از ورودی case.indm در زیر نمایش داده شده است:

```

-9.          Emin cutoff energy
1            number of atoms for which
density matrix is calculated
1 1 2        index of 1st atom, number
of L's, L1
0 0          r-index, (l,s)-index

```

که نشان می دهد برای اربیتال d اتم شماره یک باید ماتریس چگالی محاسبه شود.

بخشهای شعاعی، $r\text{-index} = X_r(r)$ ، زاویه ای، $(l,s)\text{-index} = X_{ls}(\bar{l}, \bar{s})$ ، و میانگین عملگر X در خط آخر ورودی فوق به صورت زیر تعریف می شوند:

RINDEX=0 LSINDEX=0 : فقط ماتریس چگالی محاسبه می شود.

RINDEX=1 LSINDEX=1 : $\langle x \rangle$ = تعداد الکترونها درون کره موافین-تین اتم مورد نظر.

RINDEX=2 LSINDEX=1 : $\langle x \rangle$ = مقدار چشمداشتی $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ درون کره موافین-تین اتم مورد نظر.

RINDEX=1 LSINDEX=2 : $\langle x \rangle$ = تصویر ممان اسپینی درون کره موافین-تین اتم مورد نظر.

RINDEX=1 LSINDEX=3 : $\langle x \rangle$ = تصویر ممان مداری درون کره موافین-تین اتم مورد نظر.

RINDEX=3 LSINDEX=3 : $\langle x \rangle$ = بخش مداری میدان فوق ریز در مکان هسته مورد نظر.

RINDEX=3 LSINDEX=5 : $\langle x \rangle$ = بخش دو قطبی میدان فوق ریز در مکان هسته مورد نظر.

به منظور تحقیق صحت تعاریف فوق مثلا می توان تعداد الکترونها درون کره موافین-تین یک اتم را به صورت زیر با اختیار حساب کرد(!!!):
 $r - \text{index} = 1, (l, s) - \text{index} = 1$

-9. Emin cutoff energy
 1 number of atoms for which density matrix is calculated
 1 4 0 1 2 3 index of 1st atom, number of L's, L1
 1 1 r-index, (l,s)index

ورودی case.indmc فوق نشان می دهد که برای اربیتالهای s، p، d و f اتم اول پتانسیل اربیتالی تولید می شود. ورودی case.indmc به جای case.indm نشان می دهد که محاسبات در حضور جفت شدگی اسپین-مدار انجام شده است case.scfdmup (lapwdm -c -so -up (-dn) x، که حاصل آن در خروجی case.scfdmup به صورت زیر است:

atom	L	upup	updn	dndn	total
:XOP01	0	1.16264	0.00000	1.14548	2.30812
:XOP01	1	3.11761	0.00000	3.11894	6.23655
:XOP01	2	4.46323	0.00000	1.53959	6.00282
:XOP01	3	0.00657	0.00000	0.00630	0.01286

که در آن ستون اول عبارت است از: $\langle x \rangle$ = تعداد الکترونها درون کره موافین-تین اتم مورد نظر (اتم اول). ستون دوم اربیتالهای s،

p، d و f اتم اول را نشان می دهد. ستونهای بعدی تعداد الکترونهای درون کره موافین-تین با اسپین بالا $\sqrt{n^{\uparrow}n^{\uparrow}}$ ، مخلوط $\sqrt{n^{\uparrow}n^{\downarrow}}$ و اسپین پایین $\sqrt{n^{\downarrow}n^{\downarrow}}$ را نشان می دهند، که در آنها n عدد اشغال است. ستون آخر تعداد الکترونهای اربیتالهای s، p، d و f اتم اول را نشان می دهد. جمع اعداد ستون آخر (14.56035) باید با تعداد کل الکترونهای درون کره موافین-تین اتم اول مساوی باشد. از طرفی می دانیم که تعداد کل الکترونهای درون کره موافین-تین را می توان از جمع تعداد الکترونهای اسپین بالا و الکترونهای اسپین پایین، $CHA01up+:CHA01dn=14.5639$ ، هم به دست آورد. سازگاری تقریبی دو روش نشان دهنده صحت انجام محاسبات وابسته به اربیتالها با تقریب LDA+U است. اکنون به منظور محاسبه ممان اسپینی کافی است که از ورودی case.indmc زیر استفاده کنیم:

-9. Emin cutoff energy
 1 number of atoms for which density matrix is calculated
 1 4 0 1 2 3 index of 1st atom, number of L's, L1
 1 2 r-index, (l,s)index

که در اینجا $RINDEX=1$ $LSINDEX=2$ اختیار شده است. که حاصل آن در خروجی case.scfdmup به صورت زیر است:

		Atom			
	L	upup	updn	dndn	total
:XOP01	0	0.58132	0.00000	-0.57274	0.00858
:XOP01	1	1.55880	0.00000	-1.55947	-0.00067
:XOP01	2	2.23161	0.00000	-0.76980	1.46182
:XOP01	3	0.00328	0.00000	-0.00315	0.00013

که در آن ستون اول عبارت است از: $RINDEX=1$
 $LSINDEX=2$: $\langle x \rangle$ = تصویر ممان اسپینی درون کره موافق-تین
 اتم مورد نظر. ستون دوم اربیتالهای s، p، d و f اتم اول را نشان
 می دهد. ستونهای بعدی تصویر ممان اسپینی درون کره موافق-
 تین با اسپین بالا $\sqrt{n^{\uparrow}n^{\uparrow}}$ ، مخلوط $\sqrt{n^{\uparrow}n^{\downarrow}}$ و اسپین پایین $\sqrt{n^{\downarrow}n^{\downarrow}}$ را نشان
 می دهند، که در آنها n عدد اشغال است. ستون آخر تصویر ممان
 اسپینی اربیتالهای s، p، d و f اتم اول را نشان می دهد. جمع
 اعداد ستون آخر (1.4699) نصف پارامتر ممان مغناطیسی اسپینی،
 $MMI01=2.93994$ ؛ است. ضریب دو عاملی است که از اسپین

الکترونی، S ، ممان مغناطیسی اسپینی، m_s ، بر حسب مگنتون بر می سازد، $(m_s = gS; g = 2.00)$. یک روش دیگر محاسبه ممان مغناطیسی اسپینی (بر حسب مگنتون بر) استفاده از ماتریسهای چگالی برای الکترونهای با اسپین بالا و الکترونهای با اسپین پایین به صورت زیر است:

$$\sum_L \text{Tr}(D_L^\uparrow) - \text{Tr}(D_L^\downarrow) = m_s$$

که در آن $\text{Tr}(D_L^\uparrow)$ رد ماتریس چگالی الکترونهای اسپین بالا اربیتال L است. که در این صورت حتی نیاز به تغییر خط آخر ورودی `case.indmc` نیست. با تغییر مناسب در ورودی `case.indmc` می توان ممان مداری را بر حسب تسلا حساب کرد. لازم به ذکر است که این محاسبات (میانگین عملگر X) می توانند هم به صورت خودسازگار و هم به صورت غیر خودسازگار انجام شوند. به صورت غیر خودسازگار به این معنی است که می توان خط آخر ورودی `case.indmc` را پس از پایان حل خود سازگار تغییر داد و فقط برنامه LAPWDM را یک بار (با کلیدهای مناسب) اجرا کرد. به صورت خودسازگار به این معنی است که خط آخر ورودی

case.indmc را از همان ابتدای حل خود سازگار تغییر دهیم.
امکان محاسبه میانگین عملگر X به صورت غیر خودسازگار دارای
این مزیت است که می توان عملگر X را تغییر داد و میانگین آن را
به سرعت حساب کرد.