

LAPWSO

برنامه LAPWSO بر هم کنش اسپین-مدار را در یک روند وردشی مرتبه دو در محاسبات الکترونیای ظرفیت درون کرات لحاظ می کند. این برنامه از بردارهای ویژه به طور نسبی برای اسکالری برای الکترونیای درون کرات و به طور غیر نسبی برای الکترونیای خارج از کرات به دست آمده در برنامه LAPW1 که قبلاً در خروجی case.vector ذخیره شده بوده اند استفاده می کند. اصولاً نسبت به هر شکل آن فقط بر الکترونیای درون کرات اعمال می شود، زیرا سرعت الکترونیای خارج از کرات (دور از هسته) نمی تواند زیاد باشد. منظور از محاسبات نسبی حل معادله زیر است:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \right] \Phi = \epsilon \Phi$$

که در آن دو جمله اول معادله غیر نسبیتی شرودینگر است. جمله سوم تصحیح جرم و جمله چهارم تصحیح داروینی نام دارند. جمله آخر جفت شدگی اسپین-مدار را نشان می دهد. معادله فوق از

معادله کاملاً نسبیتی دیراک با شرط کروی بودن پتانسیل و $|\varepsilon - V| \ll 2mc^2$ به دست آمده است. اسپین یک مفهوم ذاتی است که خود را به محض نوشتن معادله دیراک معرفی می کند. معادله دیراک تحت تبدیلات لورنتس ناورد است، بنابراین معادله دیراک یک معادله کاملاً نسبیتی است، و از آنجا جمله برهمکنش اسپین-مدار یک جمله نسبیتی است. در معادله فوق Φ معرف مولفه بزرگ چاربردار دستگاه است. به دلیل برهمکنش اسپین-مدار j, j_z, κ اعداد کوانتومی خوب هستند، که در آنها j و j_z مقدار عملگر اندازه حرکت زاویه ای کل $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ، و j_z و j_z مقدار مولفه z اندازه حرکت زاویه ای کل و عدد کوانتومی نسبیتی $\kappa = \pm(j + \frac{1}{2})$ (جدول 5-1) و j_z مقدار عملگر زیر است:

$$K = \begin{pmatrix} \vec{\alpha} \vec{L} + \hbar & 0 \\ 0 & -\vec{\alpha} \vec{L} + \hbar \end{pmatrix}$$

که در آن $\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ و $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ معرف ماتریسهای پاولی هستند. معادله نسبیتی را می توان به صورت زیر هم نوشت:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \left[V + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{\hbar^2}{4M^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{d}{dr} - \frac{\hbar^2}{4M^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{1+\kappa}{r} \right] g(r) = \varepsilon g(r)$$

که در آن $M = m + \frac{\varepsilon - V}{2c^2}$ جرم افزایش یافته نسبیتی و g یک تابع

شعاعی است که به صورت $\Phi = g(r) Y_{jl}^{j_z}$ تعریف می شود که در آن $Y_{jl}^{j_z}$

ویژه تابع مستقل از r عملگرهای J^2, J_z, L^2, S^2 است. برنامه

LAPWSO معادله فوق را به روش اختلال حل می کند، که به آن

روش وردشی مرتبه دوم گفته می شود.

ورودی برنامه LAPWSO، case.struct، case.inso،

case.energy، case.vsp و case.vector و خروجیهای آن

case.outputso، case.scfso و case.vectorso (جدول 5-2)

اند. این برنامه برهمکنش اسپین-مدار را به صورت یک جمله

اختلالی به هامیلتونی قبلی اضافه می کند و بردارهای ویژه جدید

را در خروجی case.verctorso قرار می دهد. مزیت این روش

افزایش سرعت محاسبات است. جفت شدگی اسپین-مدار سبب می

شود که عناصر ماتریسی غیر صفر بین اسپینهای بالا و پایین به وجود

آید. این بدان معنی است که در صورت وجود جفت شدگی

اسپین-مدار، اسپینهای بالا و پایین از هم مستقل نیستند. بنابراین

به طور طبیعی می توان با دو برابر کردن ابعاد ماتریس هامیلتونی

اسپینهای بالا و پایین را با هم در نظر گرفت. این راه برای دستگاه های بزرگ بسیار از نظر محاسباتی پرهزینه است. به همین دلیل استفاده از روش اختلال مناسبتر است. در این روش ابتدا برنامه LAPW1 معادله نسبیتی اسکالری زیر را که در آن از برهمکنش اسپین-مدار صرف نظر شده است برای الکترونهای با اسپین بالا و اسپین پایین به طور مستقل از یکدیگر حل می کند (عدد کوانتومی اسپینی در غیاب جفت شدگی اسپین-مدار عدد کوانتومی خوب است) و بردارهای ویژه را در فایل case.vector می ریزد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \left[V + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{\hbar^2}{4M^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{d}{dr} \right] g(r) = \epsilon g(r)$$

حال در مرحله دوم ویژه توابع به دست آمده از معادله فوق به عنوان پایه برای بسط مورد استفاده قرار می گیرند. ماتریسهای هامیلتونی الکترونهای اسپین بالا و الکترونهای اسپین پایین در غیاب جفت شدگی اسپین-مدار قطری هستند. برای در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار کافی است که ماتریس هامیلتونی اختلالی اسپین-مدار قطری شود تا ویژه مقادیر و ویژه بردارها با دقت نسبیتی بیشتری محاسبه شوند. ویژه بردارهای به دست آمده از

برنامه LAPWSO در فایل case.vectorso نوشته می شوند. عناصر ماتریس قطری شده جفت-شدگی اسپین-مدار برای اتمهای سنگین تا حدودی قابل ملاحظه و برای اتمهای سبک کوچک اند. اصولاً این عناصر نمی توانند زیاد بزرگ باشند زیرا قطری سازی در فضای بردارهای ویژه به دست آمده از معادله نسبیتی اسکالری انجام می شود. این بدان معنی است که بخشی از اثرات نسبیتی (تصحیح جرم و تصحیح داروینی) قبلاً در معادله نسبیتی اسکالری لحاظ شده اند. بخش باقی مانده (برهمکنش اسپین-مدار) است که بیشتر برای ترکیبهای آکتانیدی قابل ملاحظه است. برای آنکه قطری سازی در فضای تولید شده (case.vector) توسط برنامه LAPW1 به خوبی انجام شود لازم است که این فضا هر چه کاملتر باشد. برای کاملتر کردن این فضا (نسبیتی اسکالری) باید تعداد هر چه بیشتری بردار ویژه توسط LAPW1 تولید کرد. برای این منظور می توان پنجره انرژی را بازتر کرد. برای بازتر کردن پنجره انرژی $E_{\max}$ در ورودی case.in1 را افزایش می دهیم. این افزایش از 1.5 Ry گاهی تا 10 Ry لازم است که انجام شود. افزایش حد بالای پنجره انرژی (انرژی قطع) معادل با افزایش هزینه محاسباتی است. از طرفی این افزایش تا حصول

همگرایی در انرژی کل باید انجام شود. نشان داده شده است که اضافه کردن پایه $p_{1/2}$ به توابع موج شعاعی ناحیه نیمه مغزه پایه بسط را بهبود می بخشد، به طوری که حتی با $E_{\max}$ های کوچکتر (حدود 3 Ry) نیز نتایج قابل قبولی به دست می آید. علت این کاهش در انرژی قطع پس از اضافه کردن پایه شعاعی $p_{1/2}$ آن است که عمدتاً تابع موج $p_{1/2}$ در نزدیکی هسته غیر صفر است. بنابراین تلاش برای کاملتر کردن پایه در فضای نسبیتی اسکالری عمدتاً برای تولید این تابع موج $p_{1/2}$ صورت می گیرد. فلذا اگر از قبل این تابع موج تولید شده باشد تلاش بیشتر (افزایش انرژی قطع) لازم نیست. همانطور که ملاحظه می شود معادله نسبیتی اسکالری مستقل از عدد کوانتومی نسبیتی κ است. به محض در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار عدد کوانتومی نسبیتی κ وارد محاسبات می شود. اثر این عدد کوانتومی شکافتگی اربیتالها p ، d و f به صورت زیر است:

$$\begin{cases} p \rightarrow p_{1/2}, p_{3/2} \\ d \rightarrow d_{3/2}, d_{5/2} \\ f \rightarrow f_{5/2}, f_{7/2} \end{cases}$$

در بین توابع شکافته شده فوق $p_{1/2}$ از اهمیت بیشتری برخوردار است. اگرچه بین توابع موج شعاعی شکافته شده $f_{5/2}, f_{7/2}$ تفاوت چندانی وجود ندارد، تفاوت بین توابع موج شعاعی شکافته شده $p_{1/2}, p_{3/2}$ در برخی موارد قابل ملاحظه است. ملاحظات نسبیتی فقط بر الکترونهاي درون کرات اعمال می شوند، که این امر سبب می شود که نتایج تا حدودی به شعاع کرات موافین-تین بستگی داشته باشند. اضافه کردن پایه $p_{1/2}$ همچنین وابستگی به شعاع کرات موافین-تین را کاهش داده است. یک نمونه از ورودی case.inso در زیر آورده شده است:

```

WFFIL
  4  0  0
llmax, ipr, kpot
  -9.0000    3.5000          Emin, Emax
      0  0  1          h, k, l
(direction of magnetization)
  2
number of atoms with RLO
  1    -3.5    0.005 STOP          atom-
number, E-param for RLO
  3    -4.5    0.005 STOP          atom-
number, E-param for RLO
  1    2
number of atoms without SO,
atomnumbers

```

که کلیه خطوط آن در کتابچه WIEN2K به طور کامل توصیف شده اند و تا حدودی هم با توصیف ارایه شده در اینجا برای ورودی case.in1 شباهت دارند. بنابراین در اینجا به ذکر نکته زیر در باب دستگاه های مغناطیسی اکتفا می شود. در ترکیبات مغناطیسی یک جهت مرجح مغناطیسی وجود دارد. این جهت مغناطیسی در خط چهارم از ورودی case.inso در جهت محور z ها (0 0 1) اختیار شده است. اگر دستگاه مغناطیسی باشد برهمکنش اسپین-مدار در

جهت مغناطش دستگاه بیشتر از جهات دیگر خواهد بود. افزایش
برهمکنش اسپین-مدار در یک جهت نسبت به جهتهای دیگر سبب
کاهش تقارن گروه فضایی اولیه دستگاه (در غیاب برهمکنش
اسپین-مدار) می شود. تعداد عناصر گروه فضایی مکعبی 48 است.
تعداد عناصر گروه فضایی اورتورمبیک 16 است. ابعاد گروه فضایی
مکعبی با هم مساوی است ($a=b=c$)، در حالی بعد گروه فضایی
اورتورمبیک در راستای z با دو راستای دیگر مساوی نیست
($a=b < c$). انتخاب جهت z برای مغناطش یک دستگاه مکعبی
تعداد تقارنهای گروه مکعبی را از 48 به 16 در اثر برهمکنش
اسپین-مدار کاهش می دهد. این بدان معنی است که جفت-
شدگی اسپین مدار و انتخاب مغناطش در راستای z معادل با
تعویض تقارن مکعبی با تقارن کمتر اورتورمبیک است. کاهش تقارن
و بنابراین جفت شدگی اسپین-مدار در دستگاه های مغناطیسی
سبب غیر یکسان شدن بعضی از اتمهای یکسان نیز می شود. کاهش
تقارن و غیر یکسان شدن اتمها در قدم اول باید در ورودی اصلی
case.struct لحاظ شود. تغییر ورودی اصلی case.struct تقریباً
همه محاسبات را تحت الشعاع قرار می دهد، به ویژه فایلهای
case.klist، case.in2c، case.in1، case.kgen. فایل case.in2

ورودی اصلی برنامه LAPW2 است که بعداً به آن پرداخته خواهد شد. در صورت در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار باید از نسخه موهومی برنامه LAPW2 استفاده کرد. این کار با تغییر نام case.in2 به case.in2c انجام می شود. علت این امر آن است که ویژه بردارهای تولید شده چه برای دستگاه های مغناطیسی و چه غیر مغناطیسی پس از در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار (case.vectorso) موهومی اند. برای جلوگیری از نادیده گرفتن نکات فوق بهتر است که از برنامه intso_lapw استفاده شود. این برنامه ساده باید بلافاصله پس از برنامه init_lapw اجرا شود.