

MIXER

برنامه MIXER چگالیهای الکترونی الکترونهای مغزه، شبه مغزه، و ظرفیت را باهم جمع می کند. این چگالیهایی سپس با هم جمع شده و یک چگالی کل جدید حاصل می شود. اتم هیدروژن فقط یک الکترون ظرفیت دارد. بعضی از اتمها بسته به انتخاب انرژی جداسازی الکترون شبه مغزه یا گاهی مغزه ندارند. این برنامه بهنجار سازی چگالیهایی را تحقیق و در صورت لزوم به طور مناسب با اضافه کردن یک چگالی بار ثابت به ناحیه خارج از کرات آنها را بهنجار می کند. می دانیم که به طور ساده استفاده کردن از چگالیهای جدید در یک روند چرخه ای خود سازگار به ناپایداری جوابها (عدم همگرایی یا دیر همگرا شدن) می انجامد. بنابراین پایدار کردن حل خود سازگار ضروری است. در برنامه وین چگالی خروجی با چگالی ورودی در هم ادغام شده تا یک چگالی جدید به عنوان ورودی به دست آید. دواروش ادغام در وین وجود دارد: الف) استفاده از ضریب Q در روش Pratt به صورت

$$\rho_{\text{new}}(\vec{r}) = (1 - Q)\rho_{\text{old}}(\vec{r}) + Q\rho_{\text{output}}(\vec{r})$$

ب) روش ترکیبی Broyden-II (Singh et al.).

تعیین هر یک از دو روش فوق در ورودی case.inm زیر انجام می شود:

```
BROYD 0.d0 YES (PRATT/BROYD,  
background charge (+1 for additional  
e) , NORM
```

0.4

MIXING FACTOR

استفاده از روش BROYD (تعیین شده در خط اول) با ضریب ترکیب کوچکتر از 0.4 (تعیین شده در خط دوم) مثلاً (0.01) به ویژه برای دستگاه های مغناطیسی توصیه می شود. در زیر ورودی case.inorb مجدداً به منظور تأکید بیشتر آورده شده است:

```
PRATT, 1.0
```

```
mixmod,
```

```
amix
```

```
1 1 2
```

```
iatom
```

```
nlorb, lorb
```

```
2 1 2
```

```
iatom
```

```
nlorb, lorb
```

```
1
```

```
nsic
```

```
(LDA+U(SIC) used)
```

```
0.59 0.07
```

```
U J
```

```
0.59 0.07
```

```
U J
```

مقایسه ورودیهای case.inorb و case.inm نشان می دهد که در دستگاه هایی با پتانسیل اربیتال (یعنی جایی که تقریب LDA+U

ضروری است) دو بار عمل ترکیب انجام می شود. یک بار توسط برنامه ORB و یک بار توسط برنامه MIXER. ذکر این نکته اهمیت دارد که در تقریب LDA+U همگرایی بار یا انرژی در بسیاری از دستگاه های به طور قوی همبسته بسیار کند انجام می شود و در پاره ای از موارد به ناپایداری می انجامد. دلایل متعددی برای این امر وجود دارد. یکی از آنها انتخاب روش و ضریب ترکیب است. تجربه نشان داده است که در case.inorb بهتر است از روش ترکیبی PRAT با ضریب بزرگ 1.0 به منظور همگرایی سریعتر ماتریس چگالی استفاده شود. این در حالی است که هنوز روش BROYD با ضریب کوچک 0.01 ارجحتر است. بار زمینه، bgch، که در خط اول 0.d0 اختیار شده است می تواند مقادیر مثبت یا منفی به خود اختصاص دهد. مقدار مثبت bgch به معنی تزریق بار به دستگاه و مقدار منفی به معنی کم کردن بار از دستگاه است.