

ORB

برنامه ORB پتانسیلهای وابسته به اربیتال (پتانسیلهای اربیتالی) را محاسبه می کند. پتانسیلهای اربیتالی پتانسیلهایی اند که فقط در کرات موافین-تین غیر صفر می باشند و به اعداد کوانتومی l, m وابسته اند. در حال حاضر برای اجرای این برنامه - `x orb` (`up/dn`) ماتریس چگالی مورد نیاز است. برای تولید ماتریس چگالی کافی است دو دستور زیر به تفکیک اجرا شوند:

`x lpwdm -up`
`x lapwdm -dn`

در مورد برنامه `lapwdm` بعدا بحث خواهد شد. ورودیهای این برنامه (ORB) `case.struct`، `case.inorb`، `case.dmat` و `case.vsp` و خروجیهای آن `case.outputorb`، `case.scforb` و `case.vorb` اند. ورودی `case.inorb` برای مثال `NiO` که در ساختار آن دو اتم غیر یکسان `Ni` وجود دارند می تواند به صورت زیر باشد:

1 2 0	nmod,
natorb, ipr	
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

که در خط اول با انتخاب $nmod=1$ خود را فقط به استفاده از روش LDA+U^{SIC} محدود کرده ایم. که در آن روش LDA+U^{SIC}، به ازای مقادیر $U=0.59$ Ry, $J=0.07$ Ry برای هر یک از Ni ها، به کار برده شده است. شاخص nsic در فایل فوق علاوه بر مقدار 1 می تواند دو مقدار دیگر 0 و 2 را نیز به خود اختصاص دهد. شاخص صفر، $nsic=0$ ، متناظر با روش LDA+U^{AMF} است، که به آن LDA+U^{DFT} نیز می گویند. شاخص یک، $nsic=2$ ، متناظر با روش LDA+U^{HMF} است.

این روشها تقریبا یکسان هستند و تفاوت آنها در نحوه کم کردن بر همکنش الکترونیهای اربیتال همبسته با یکدیگر مطابق مدل گاز همگن (double counting term) است. لازم به ذکر است که پارامتر ترکیبی (Mixing Parameter) مورد استفاده که در اینجا برابر یک در روش PRATT اختیار شده است نباید خیلی کوچکتر یا خیلی بزرگتر از یک اختیار شود (عدد یک برای اغلب ترکیبات بهینه است). تغییر پارامتر ترکیب در فایل case.inorb با پارامتر ترکیبی دیگر در فایل case.inm ایجاد مشکل می کند و همگرایی مطلوب را تحت الشعاع قرار می دهد. پارامتر ترکیبی در فایل case.inm می تواند هر اندازه کوچکتر از مقدار پیش فرض آن یعنی 0.4 اختیار شود (مثلا 0.01 برای دستگاه های مغناطیسی). در خطوط 3 و 4 از فایل case.inorb فقط اربیتال d دو اتم غیر یکسان Ni برای اعمال تقریب LDA+U تعیین شده اند0 خروجیها شامل ماتریس چگالی و عناصر ماتریسی پتانسیل اربیتالی اند.