

ترتیب اجرای برنامه های WIEN2k

ترتیب اجرای برنامه ها در شکل زیر نشان داده شده است. این ترتیب به دو مرحله مجزا تفکیک می شود. مرحله اول آماده سازی (Initialization) و مرحله دوم حل خود سازگار (Self Consistent Solution) نامیده می شوند. مرحله آماده سازی به ترتیب از چپ به راست شامل برنامه های زیر می باشد:

NN, SGROUP, SYMMETRY, LSTART, KGEN, DSTART

مرحله حل خود سازگار دارای دو مسیر متفاوت مستقل است، که در هر مسیر معادلات الکترونی و نحوه حل این معادلات با مسیر دیگر متفاوت است. مسیر سمت چپ که به حل الکترونیهای ظرفیت (Valance) و شبه مغزه (Semi Core) به طور نسبیتی نرده ای (Scalar Relativistic) به روش (APW+lo) در چارچوب نظریه تابعی چگالی می پردازد به ترتیب از چپ به راست شامل برنامه های زیر است:

LAPW0, LAPW1, LAPW2, LAPWSO, LAPWDM, ORB

مسیر سمت راست که به حل الکترونیهای مغزه (Core) به طور کاملاً نسبیتی (Fully Relativistic) به روش (Dirack-Fock) می پردازد به ترتیب از چپ به راست شامل دو برنامه زیر است:

LAPW0, LCORE

که در آنها تعداد الکترونیهای هر مسیر به انتخاب انرژی جداسازی (Separation Energy) بستگی دارد. انرژی جداسازی کمتر متناظر با تعداد الکترونیهای مغزه کمتری است که برنامه اتمی LCORE به حل آنها می پردازد، و بنابراین متناظر با تعداد الکترونیهای ظرفیت یا شبه مغزه بیشتری است که به روش LAPW مورد مطالعه قرار می گیرند. همان طور که ملاحظه می شود نقطه افتراق این دو مسیر مستقل برنامه آغازین مرحله حل خودسازگار، LAPW0، می باشد. این بدان معنی است که ترتیب اجرای برنامه LCORE می تواند شناور هر جا پس از برنامه LAPW0 مثلاً به صورت زیر باشد:

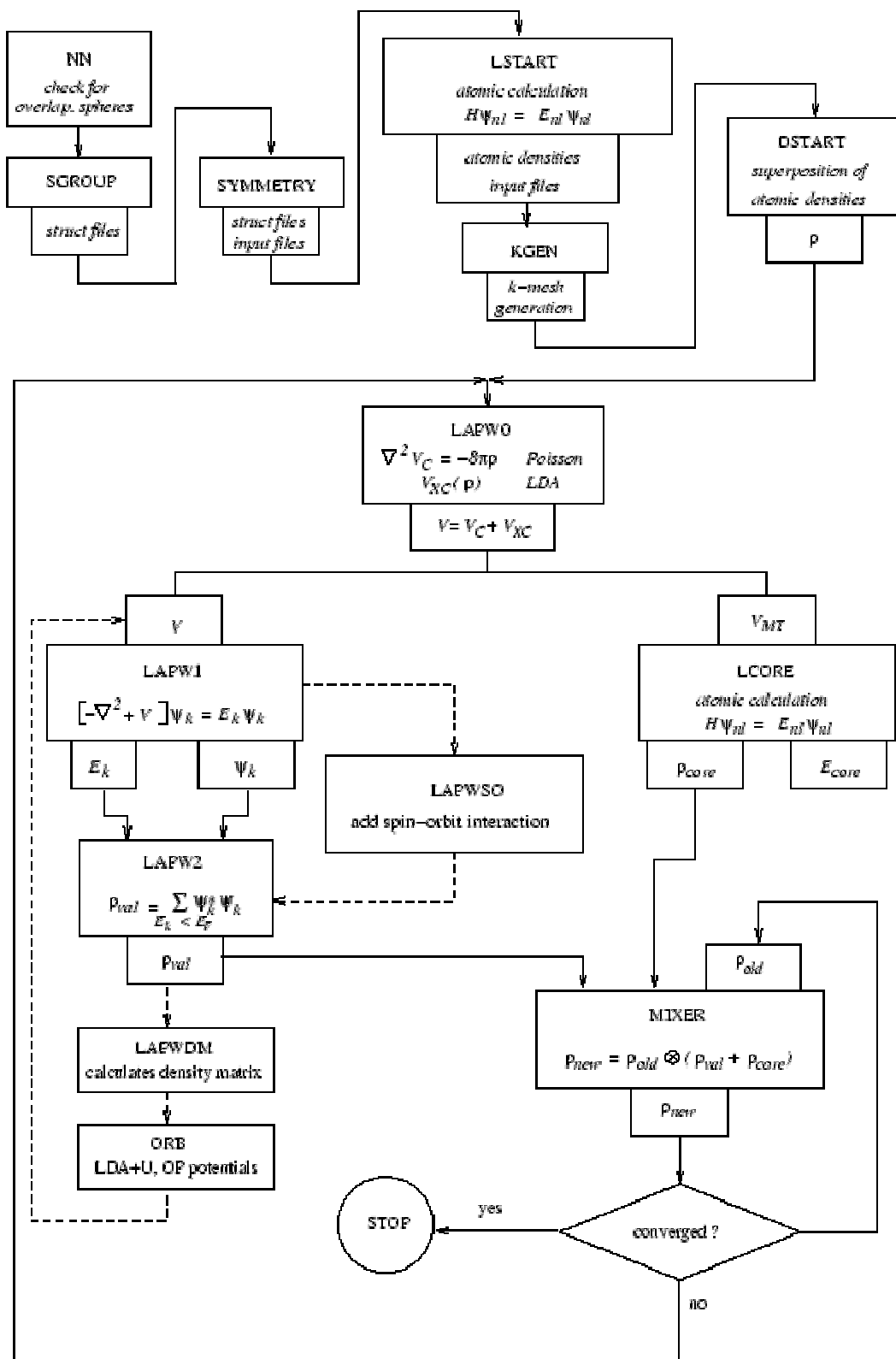
LAPW0, LAPW1, LAPW2, LAPWSO, LAPWDM, ORB, LCORE

برنامه **LAPW2** چگالی الکترونیهای ظرفیت و شبه مغزه را به دست می دهد. برنامه **LCORE** چگالی الکترونیهای مغزه را به دست می دهد. چگالیهای به دست آمده از این دو مسیر با برنامه **MIXER** ترکیب می شوند. یک چرخه کامل از حل خود سازگار شامل برهمکنش اسپین-مدار و ملاحظات ویژه پتانسیل اربیتال به صورت زیر است:

LAPW0, LAPW1, LAPW2, LAPWSO, LAPWDM, ORB, LCORE, MIXER

این چرخه تا حصول همگرایی کمیت یا کمیتهای فیزیکی مورد نظر ادامه می یابد. شرح مختصر وظایف برنامه ها موضوع بخش بعدی این فصل می باشد. البته در نسخه کنونی برنامه **ORB** بلافاصله پس از **LAPW0** انجام می شود، یعنی یک چرخه کامل از حل خود سازگار شامل برهمکنش اسپین-مدار و ملاحظات ویژه پتانسیل اربیتال (در حال حاضر!) به صورت زیر است:

LAPW0, ORB, LAPW1, LAPW2, LAPWSO, LAPWDM, LCORE, MIXER



شکل : ترتیب اجرای برنامه ها مرحله آماده سازی (Initialization) و مرحله حل خود سازگار (Self Consistent Solution) .