

برنامه های مرحله حل خودسازگار

LAPW0

برنامه LAPW0 پتانسیل کلمبی $V_{coul} = V_{Ne} + V_{ee}$ ، پتانسیل تبادلی همبستگی V_{XC} و پتانسیل کل $V_{tot} = V_{coul} + V_{XC}$ بکار رفته در معادله کوهن-شم $(-\nabla^2 + V_{Ne} + V_{ee} + V_{XC})\chi_{ik}^\sigma(r) = \epsilon_{ik}^\sigma \chi_{ik}^\sigma(r)$ را محاسبه می کند.

ورودی این برنامه case.struct، case.in0 و case.clmsum و خروجیهای آن case.scf0، case.output0 و case.vns و case.vsp اند. خروجیهای case.vns و case.vsp که با استفاده از ورودی case.clmsum به عنوان چگالی الکترونی به دست می آیند حاوی به ترتیب بخش کروی پتانسیل $V_{L=0,M=0}(r)$ و بخشهای غیر کروی پتانسیل $V_{L\neq 0,M}(r)$ در نمایش کاهش ناپذیر هماهنگیهای شبکه می باشند. نوع تقریب بکار رفته برای پتانسیل تبادلی همبستگی توسط برنامه init_lapw سوال می شود و پاسخ آن به صورت یک عدد در case.in0 به عنوان ورودی برنامه LAPW0 نوشته می شود. این عدد که در فایل case.in0 زیر 13 انتخاب شده است:

```
TOT 13 MULT/COUL/EXCH/POT /TOT ; VXC-SWITCH
NR2V (R2V / NR2V) (#Exchange-correlation (case.r2v), Coulomb and total
) to a  $r^2V$  potentials (case.vcoul) are written as (
file for plotting with lapw5)
0 0.0 (#of FK in E-field expansion, EFELD (Ry)
0 (list of K-vectors)
```

می تواند هر یک از اعداد متعارفتر زیر:

1 Moruzzi, Janak, Williams(78)

5 Perdew and Wang 92, reparameterization of Ceperly-Alder data, the recommended LDA option

13 Generalized Gradient approximation (Perdew-Bourke-Ernzerhof 96)

14 Generalized Gradient approximation (Perdew-Wang 91)

12 Meta GGA (Perdew et al. 2000).

و یا اعداد دیگر ارایه شده در جدول انواع پتانسیلهای موجود در کد WIEN2k (به بخش آماده سازی مراجعه فرمایید) باشد. توصیف خط دوم در ورودی گنجانده شده است. دو خط آخر ورودی case.in0

اختیاری بوده و می تواند حذف شود. این دو خط آخر برای معرفی میدان الکتریکی از طریق یک پتانسیل
زیک زاکی بکار برده می شوند. برای به کار بردن تقریب Meta-GGA لازم است مراحل زیر انجام شود:
الف) حداقل یک چرخه از مرحله حل خودسازگار با تقریب GGA یعنی استفاده از عدد 13 در case.in0
اجرا شود، و سپس تغییر عدد 13 به عدد 12 به منظور استفاده از تقریب Meta-GGA.
ب) ساختن فایل case.inm_vresp. ساختار این فایل و فایل case.inm یکسان است. بنابراین کافی است
یک نسخه اضافی از فایل case.inm به نام case.inm_vresp تهیه شود (cp case.inm case.inm_vresp)
ج) استفاده از چگالیهای بار غیر نرمالیزه. این کار با قرار دادن norm=NO در فایل case.inm_vresp انجام
می شود.

د) افزایش انرژی قطع در بسط پتانسیل بر حسب امواج تخت خارج از کرات موفین-تین در فایل case.in2
از 14 به 24.9 ($G_{max}=24.9$). در پایان اجرای مرحله حل خود سازگار تا حصول همگرایی مطلوب.
در تقریب Meta-GGA پتانسیل تبدلی همبستگی نظریه تابعی چگالی از برازش تقریب GGA که در آن
تغییرات پتانسیل تبدلی همبستگی به آرامی صورت می گیرد دست می آید. در تقریبهای شیب تعمیم یافته
(GGA) فقط چگالی موضعی و مشتق اول آن به عنوان ورودی مورد نیاز است، در حالی که در تقریب ماورا
GGA یا همان (Meta GGA) چگالی انرژی جنبشی اریتمالی نیز مورد نیاز است، که به همین دلیل باید از
حد بالای G_{max} استفاده شود. مولفه انرژی تبدلی تقریب ماورا GGA با دقت زیادی از مرتبه چهار تخمین
زده می شود، در حالی که هنوز خطای ناشی از خود-برهمکنش الکترونها در مولفه انرژی همبستگی تقریب
ماورا GGA وجود دارد. پیامدهای این تقریب عبارتند از:

الف) بهبود چشم گیر انرژیهای اتمی سازی مولکولی و انرژیهای سطحی فلزات.
ب) تغییر اندک در ثابتهای شبکه.

پتانسیل V_{coul} درون کرات مستقیماً به روش گرین به طور کلاسیکی با اعمال شرایط مرزی محاسبه می شود.
پتانسیل V_{coul} در ناحیه خارج از کرات از طریق بسط فوریه چند قطبی چگالی محاسبه می شود. چگالی در
ناحیه خارج از کرات به راحتی به صورت سری فوریه بسط داده می شود زیرا در این ناحیه چگالی برحسب
امواج تخت بسط داده شده است. مقدار این سری فوریه چگالی فقط در ناحیه خارج از کرات قابل قبول
است یعنی مقادیر آن در درون کرات غلط می باشند. پس در درون کرات دو نوع ممان چند قطبی وجود
دارد: یکی ممان چند قطبی صحیح درون کرات Q_{SP} و دیگری ممان چند قطبی ناصحیح Q_{PW} خارج از کرات
(امتداد یافته به درون کرات) یعنی جایی که چگالی بر حسب امواج تخت بسط داده می شود. برای رفع این
نقصه کافی است که ابتدا ممان تفاضلی یا شبه ممان زیر را تعریف کنیم:

$$Q_{\text{diff}} = Q_{\text{SP}} - Q_{\text{PW}}$$

سپس یک چگالی بر حسب امواج-تخت به گونه ای بسط داده شود که ممان تفاضلی فوق را تولید کند، مشروط بر آن که مقدار آن در ناحیه خارج از کرات صفر باشد. اگر این سری جدید از چگالی با دو شرط فوق به سری نخست در ناحیه خارج از کرات اضافه شود، آنگاه: الف) یک بسط صحیح از بار خارج از کرات خواهیم داشت، ب) ممانهای بار چند قطبی درون تمام کرات تولید می شوند. بنابراین پتانسیل کلمبی ناحیه های خارج و درون کرات قابل محاسبه می شوند. گرادیان میدان الکتریکی (EFG) نیز در نزدیکی مکانهایی از هسته ها ($< 0.2 \text{\AA}$) با تقارن غیر مکعبی در برنامه LAPW0 قابل محاسبه است.

ORB

برنامه ORB پتانسیلهای وابسته به اربیتال (پتانسیلهای اربیتالی) را محاسبه می کند. پتانسیلهای اربیتالی پتانسیلهایی اند که فقط در کرات موفین-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 lapwdm -up
x lapwdm -dn
```

در مورد برنامه lapwdm بعدا بحث خواهد شد. ورودیهای این برنامه (ORB) case.inorb, case.struct, case.vsp و case.dmat 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
PRATT,1.0
1 1 2
2 1 2
1
0.59 0.07
0.59 0.07
```

```
nmod, natorb, ipr
mixmod, amix
iatom nlorb, lorb
iatom nlorb, lorb
nsic (LDA+U(SIC) used)
U J
U J
```

که در خط اول با انتخاب $nmod=1$ خود را فقط به استفاده از روش LDA+U 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 تقریباً 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 (مثلاً 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 اند 0 خروجیها شامل ماتریس چگالی و عناصر ماتریسی پتانسیل اربیتالی اند.

LAPW1

برنامه LAPW1 هامیلتونی دستگاه و ماتریس روی هم افتاگی را تشکیل می دهد و با قطری سازی مقادیر ویژه و بردارهای ویژه را محاسبه می کند. علاوه بر روش استاندارد LAPW می توان از روش APW+lo نیز در نسخه اخیر استفاده کرد. برای ساختارهایی که از تقارن وارون برخوردار نیستند، که در آنها عناصر ماتریس هامیلتونی و روی هم افتادگی اعداد موهومی اند، از نسخه موهومی این برنامه LAPW1C باید استفاده کرد (x lapw1 -c -up/dn). زمان اجرای برنامه LAPW1 به ابعاد ماتریس هامیلتونی بستگی دارد، که در صورت استفاده از تعداد k-های زیاد از زمان اجرای بقیه برنامه ها به مراتب بیشتر است. برای رفع این نقیصه تقسیم تعداد k-ها بین کامپیوترهای مختلف پیش بینی شده است، که به راحتی قابل استفاده است (x lapw1 -p -c -up/dn). علاوه بر این در نسخه جدید روتینهای استاندارد LAPCK نیز بهینه شده اند، که به آنها روتینها قطری سازی کامل گفته می شود. در عمل قطری سازی به طور کامل انجام نمی شود. عمل قطری سازی به صورت تدریجی و مرحله به مرحله با استفاده از روش block-Davidson انجام می شود. این روش اگرچه تقریبی است ولی از روش استاندارد (تصحیح نشده) LAPCK سریعتر است به ویژه در مواردی که ابعاد

ماتریس هامیلتونی بزرگ باشد. اشکال این روش این است که به حافظه (RAM) بیشتری نیاز دارد زیرا در این روش اطلاعات مرحله قبل (بردارهای ویژه تولید شده در مرحله حل خودسازگار قبل) برای محاسبه بردارهای ویژه جدید مورد نیازاند. بنابراین بردارهای ویژه مرحله قبل و مرحله جدید به طور همزمان باید قابل دسترس باشند، که این امر حافظه RAM بیشتری را طلب می کند.

ورودی این برنامه case.struct، case.in1 و case.vsp و خروجیهای آن case.output1، case.scf1، case.vector و case.energy است. این برنامه ورودی case.vnsپ را نیز می پذیرد که قبلاً در توصیف برنامه LAPW0 به آن پرداخته شده است. در صورت وجود case.vnsپ حل با پتانسیل کامل انجام می شود. ورودی case.in1 در صورت عدم وجود تقارن وارون باید به case.in1c تبدیل شود (mv case.in1 case.in1c). ورودی case.in1 برای مثال TiO_2 می تواند به صورت زیر باشد:

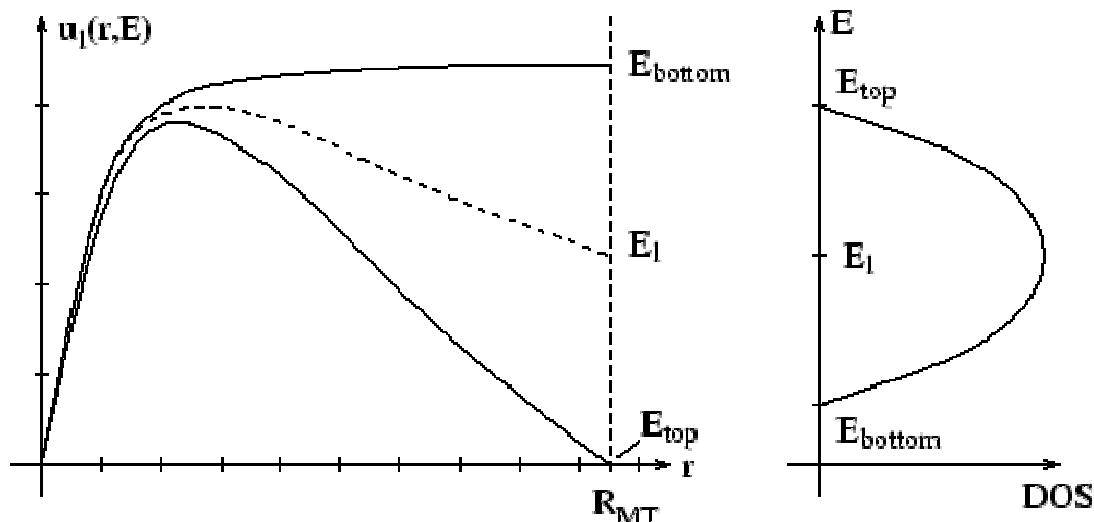
```
WFFIL (WFPRI,WFFIL,SUPWF ; wave fct. print,file,suppress
7.500 10 4 (R-mt*K-max; MAX 1, max 1 for hns )
0.30 5 0 (global energy parameter E(1), with 5 other choices, LAPW)
0 -3.00 0.020 CONT 0 ENERGY PARAMETER for s, LAPW+LO
0 0.30 0.000 CONT 0 ENERGY PARAMETER for s-local orbital, LAPW-LO
1 -1.90 0.020 CONT 0 ENERGY PARAMETER for p LAPW+LO
1 0.30 0.000 CONT 0 ENERGY PARAMETER for p-local orbitals LAPW-LO
2 0.20 0.020 CONT 1 APW+lo
0.20 3 0 (global energy parameter E(1), with 1 other choice, LAPW)
0 -0.90 0.020 STOP 0 LAPW+LO
0 0.30 0.000 CONT 0 LAPW-LO
1 0.30 0.000 CONT 1 APW+lo
K-VECTORS FROM UNIT:4 -9.0 1.5 IUNIT, Emin, Emax
```

که در آن $R\text{-mt} \times K_{\text{max}} = 7.5$ پارامتری است که سرعت و دقت اجرای برنامه را تعیین می کند. $R\text{-mt}$ کوچکترین شعاع کره موفین-تین است. K_{max} بیشینه اندازه بردار موج در بسط توابع موج خارج از کرات بر حسب امواج تخت است. در بسط توابع موج بر حسب امواج تخت، K_{max}^2 انرژی قطع بر حسب R_y را تعیین می کند. این پارامتر را با RK_{max} نیز نمایش می دهند. مقدار معمول آن در روش APW+lo در بازه [5, 9] و در روش LAPW+LO در بازه [6, 10] بر حسب $\text{bohr} \times \sqrt{R_y}$ بسته به میزان دقت محاسبات متغیر است. زمان اجرای برنامه LAPW1 و دقت محاسبات با افزایش این پارامتر افزایش می یابد. افزایش این پارامتر معادل با افزایش انرژی قطع است. دقت نسبی قابل قبول در روش LAPW که با $RK_{\text{max}} = 8$ حاصل

می شود، تقریباً متناظر و قابل مقایسه با دقت حاصل از 7 یا $RK_{max}=6.5$ در روش APW+lo است. این بدان معنی است که سرعت اجرا در روش APW+lo تقریباً ده برابر بیشتر از روش LAPW+LO است. عدد صفر (ستون آخر) در خط 0 CONT 0.000 0.30 1 از ورودی case.in1 فوق معرف استفاده از روش LAPW است. قرار دادن عدد یک به جای این عدد صفر معرف استفاده از روش APW است. عدد یک (ستون اول) از این خط عدد کوانتومی $l=1$ را نشان می دهد و در واقع به اربیتال d اشاره می کند. ستون دوم به الکترونها ی اربیتال d اتم غیر یکسان اول انرژی میانگین اتمی $E_{l=1}=0.3$ Ry را نسبت می دهد. این بدان معنی است که توقع داریم انرژی الکترونها ی اربیتال d در بلور تقریباً حول این مقدار میانگین توزیع شوند. انتخاب انرژی میانگین $E_{l=1}=0.3$ Ry برای دستگاه هایی که سطح فرمی آنها کمتر از 0.5 Ry باشد مناسب است. برای دستگاه هایی با انرژیهای فرمی بزرگتر (اکتانیدهای سنگین) انرژی میانگین فوق می تواند افزایش یابد. در چنین مواردی به جای افزایش تک تک انرژیهای اربیتالهای ظرفیت اتمهای مختلف راحتتر آن است که در خط زیر (خط سوم از case.in1)

0.30 5 0 (global energy parameter E(1), with 5 other choices, LAPW)

عدد 0.3 در ستون اول یعنی پارامتر انرژی سراسری را افزایش دهیم. اما در هر صورت بهتر آن است که خطی سازی انرژی همواره تحقیق شود. خطی سازی انرژی یعنی یافتن انرژی میانگین E_l ، مناسب هر اربیتال برای هر اتم غیر یکسان. به عبارت دیگر خطی سازی انرژی عبارت است از یافتن میانگین حسابی به ازای هر 1 از هر اتم مطابق شکل 5-1:

$$\frac{E_{top} + E_{bottom}}{2}$$


نحوه تغییرات پاسخ معادله شعاعی شرودینگر $u_1(r, E)$ بر حسب r در شکل سمت چپ 1-5 نمایش داده

شده است. انرژی E_{top} از معادله $u_1(r, E)|_{r=R_{\text{MT}}} = 0$ و انرژی E_{bottom} از معادله $\left. \frac{\partial u_1(r, E)}{\partial r} \right|_{r=R_{\text{MT}}} = 0$ به

دست می آیند. به روش عددی گاهی این انرژیها قابل حصول نیستند، که در این شرایط خطی سازی بارسم

چگالی حالت مورد نظر باید انجام شود. برای این منظور کافی است که چگالی حالت مورد نظر رسم و به

طور میانگین و سط منحنی DOS جایی (آن انرژی) که احتمال حضور الکترون در آن بیشتر است اختیار شود.

توصیه می شود که خطی سازی به صورت ساده با اضافه کردن کلید، `-inlnew 2`، به برنامه `run_lapw`

(`runsp_lapw`) به صورت `(runsp_lapw -inlnew 2)` `run_lapw -inlnew 2` انجام و سپس فقط

صحت آن تحقیق شود. خط آخر ورودی `case.in1` به صورت زیر است:

K-VECTORS FROM UNIT:4 -9.0 1.5 IUNIT, Emin, Emax

که در آن بازه $[E_{\text{min}}=-9.0, E_{\text{max}}=1.5]$ پنجره ای را از انرژی بر حسب ریدبرگ بر روی تمام محاسبات می

گشاید. این بدان معنی است که کلیه محاسبات فقط در این بازه از انرژی انجام می شود. بین انرژی

جداسازی (S.E.) و انرژی E_{min} رابطه $E_{\text{min}} = \text{S.E.} - 1$ وجود دارد. افزایش انرژی E_{max} در محاسبات نسبیتی

عددی یا اسکالری نقش به سزایی در افزایش دقت محاسبات دارد. افزایش انرژی E_{max} تا حصول همگرایی

مطلوب در انرژی کل دستگاه جایی که نقش بر همکنش اسپین-مدار مهم است (مثلا در آکتانیدها) ضروری

است. در این پنجره انرژی در ناحیه شبه مغزه حالتی وجود دارند که برای بررسی آنها باید از اربیتالهای

موضعی (local orbitals) استفاده گردد. این اربیتالهای موضعی با LO در روش LAPW نمایش داده می

شوند و به آن روش LAPW+LO می گویند. در روش APW اربیتالهای موضعی با lo نمایش داده می شوند

که در صورت استفاده از این اربیتالها به روش محاسبه روش APW+lo گفته می شود. برای هر اربیتال می

توان در ورودی `case.in1` دو پایه یکی در ناحیه ظرفیت و دیگری در ناحیه شبه مغزه تعریف کرد. مثلا سه

خط زیر از ورودی `case.in1` را در نظر بگیرید:

1	-1.90	0.020	CONT	0	ENERGY PARAMETER for p	LAPW+LO
1	0.30	0.000	CONT	0	ENERGY PARAMETER for p-local orbitals	LAPW-LO
2	0.20	0.020	CONT	1		APW-lo

خطوط دوم و سوم دو پایه در ناحیه ظرفیت را به ترتیب برای اربیتالهای p و d نمایش می دهند. خط اول یک پایه در ناحیه شبه مغزه را برای اربیتال p نمایش می دهد. به این پایه اربیتال موضعی گفته می شود. بنابراین در این مثال از روش LAPW+LO استفاده شده است. در این مثال از روش APW+lo استفاده نشده است، زیرا برای پایه APW اربیتال موضعی تولید نکرده ایم، که البته این کار را نیز می توان انجام داد. لفظ موضعی در اینجا به کوچک بودن بازه انرژی جایی که چگال حالت در ناحیه شبه مغزه تشکیل می شود اشاره دارد. چگالی حالتها در نواحی نیمه مغزه تیز یا موضعی هستند.

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 قبلا در خروجی case.vector ذخیره شده بوده اند استفاده می کند. اصولا نسبیت 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 نسبیتی 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 کاملا نسبیتی دیراک با شرط کروی بودن پتانسیل و $|\epsilon - V| \ll 2mc^2$ 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 کاملا نسبیتی است، و از آنجا جمله بر همکنش اسپین-مدار یک جمله نسبیتی است. در معادله فوق Φ معرف مولفه بزرگ چاربردار دستگاه است. به دلیل برهمکنش اسپین-مدار j_z, j_z, k اعداد کوانتومی خوب هستند، که در آنها j و k مقدار عملگر اندازه حرکت زاویه ای

کل $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ، j_z ویژه مقدار مولفه z اندازه حرکت زاویه ای کل و عدد کوانتومی نسبیتی $\kappa = \pm(j + \frac{1}{2})$ (جدول 1-5) ویژه 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:

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

که در آن $M = m + \frac{\epsilon - V}{2c^2}$ 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، case.vector و خروجیهای case.outputso، case.scfso و case.vectorso (جدول 2-5) 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 پر هزینه 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 الکترونیهای اسپین بالا و الکترونیهای 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 نسبی 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 کوانتمی نسبیتی κ است. به محض در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار عدد کوانتمی نسبیتی κ وارد محاسبات می شود. اثر این عدد کوانتمی 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 الکترونهای درون کرات اعمال می شوند، که این امر سبب می شود که نتایج تا حدودی به شعاع کرات موافق-تین بستگی داشته باشند. اضافه کردن پایه $p_{1/2}$ همچنین وابستگی به شعاع کرات موافق-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 مرجع 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 فایل های `case.in2c`، `case.klist`، `case.in1`، `case.kgen`، `case.in2`، `case.in1` و `case.in2` فایل 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.

LAPW2

برنامه LAPW2 از مقادیر ویژه (`case.vector`) محاسبه شده در برنامه LAPW1 و یا از مقادیر ویژه (`case.vectorso`) محاسبه شده در برنامه LAPWSO استفاده می کند. برنامه LAPW2 با استفاده از این مقادیر ویژه انرژی فرمی و بسطهای چگالیهای بارالکترونی به صورت زیر

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{L,M} \rho_{LM}(\vec{r}) Y_{LM} & ; \vec{r} \in S \\ \sum_{\vec{K}} V(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} & ; \vec{r} \in I \end{cases}$$

را برای هر حالت اشغال شده درون کرات (S) و هر بردار موج $\vec{K}$ برون کرات (I) محاسبه می کند. سپس بارهای جزئی (نواحی ظرفیت و شبه مغزه) درون کرات و بار خارج کرات با انتگرالگیری محاسبه می شوند. ورودی این برنامه case.struct, case.vector, case.vsp, case.energy و خروجیهای آن case.output2, case.scf2, case.clmval, case.clmsc, case.help3*, case.qtl و case (جدول 5-2) اند. بارهای جزئی برای هر حالت (ویژه مقدار انرژی) و هر بردار $\vec{K}$ را می توان در خروجیهای case.help31, case.help32 و غیره یافت، که در آنها عدهای آخر (مثلا 1 یا 2 در اینجا) به شاخص اتمی اتمهای غیر یکسان اشاره دارند. این برنامه همچنین تصحیح نیروی پاولی را محاسبه می کند و آن را به نیروهای قبلا محاسبه شده در مکان هسته ها (بدون در نظر گرفتن تصحیح پاولی) اضافه می کند. اگر یک دستگاه فاقد تقارن وارون باشد باید برنامه LAPW2C اجرا شود (x lapw2 -c). برنامه run(sp)_lapw, برنامه LAPW2C را فراخوانی می کند، اگر ورودی case.in2c وجود داشته باشد. اگر یک دستگاه حاوی تقارن وارون هم باشد، گاهی لازم است که LAPW2C اجرا شود. بردارهای ویژه (case.vectorso) حاصل از برنامه LAPWSO حتی در غیاب قطبیدگی اسپینی همیشه اعداد موهومی اند. بنابراین در حضور برهمکنش اسپین-مدار باید برنامه LAPW2C اجرا شود، حتی اگر دستگاه داری تقارن وارون باشد. اما اگر دستگاه دارای تقارن وارون باشد کافی است که برنامه LAPW1 اجرا شود. یکی از مزایای استفاده از برنامه initso_lapw این است که خود ورودی case.in2c را تولید می کند. اگر بخواهیم محاسبات را فقط به الکترونهای ناحیه شبه مغزه معطوف کنیم کافی است که از برنامه LAPW2S استفاده کنیم. ورودی اصلی برنامه LAPW2S عبارت است از case.in2s. چگالیهای بار (ناحیه شبه مغزه) در صورت استفاده از برنامه LAPW2S در case.clmsc به جای case.clmval ذخیره می شوند. یک نمونه از ورودی اصلی (case.in2) برنامه LAPW2 به صورت زیر است:

```
TOT (TOT, FOR, QTL, EFG)
-9.0 32.000 0.5 0.05 (EMIN, # of electrons, ESEPERMIN, ESEPERO )
TETRA 0.0 (EF-method (ROOT, TEMP, GAUSS, TETRA, ALL), value)
0 0 2 0 2 2 4 0 4 2 4 4
0 0 1 0 2 0 2 2 3 0 3 2 4 0 4 2 4 4
14.0 (GMAX)
FILE (NOFILE, optional)
```

پارامتر $G_{\max}$ انرژی قطع بر حسب $(Ry)^{1/2}$ برای بسط پتانسیل و چگالی (و نه توابع موج) را در ناحیه خارج از کرات موفین-تین تعیین می کند. حد پایین این پارامتر 9 و حد بالای آن 25 است $(9.0 \leq G_{\max} \leq 25.0)$. اگرچه 14 عدد مناسبی برای این پارامتر در موارد متعددی به شمار می رود، ولی

تحقیق همگرایی پارامترهای مورد نظر با افزایش این پارامتر ضروری است. شاخصی به نام g_{min} در خروجی case.outputd برنامه LSTART وجود دارد، که کوچکتر بودن آن از انرژی قطع ضروری است $G_{max} > g_{min}$. گاهی شرط $G_{max} > g_{min}$ برآورده نمی شود، که برشمردن علت‌های آن می تواند در رفع مشکل کمک کند.:

الف) کوچک بودن شعاع کره موفین- موفین، که در اتم‌های خیلی سبک ضروری است.

ب) بزرگ بودن پارامتر RK_{max} .

ج) کوچک بودن پارامتر G_{max} .

بهترین راه حل افزایش خود پارامتر G_{max} است. ولی پارامتر G_{max} دارای یک حد بالاست. پس از انتخاب بزرگترین پارامتر G_{max} راه دوم کاهش پارامتر RK_{max} است. ولی کاهش پارامتر RK_{max} دقت محاسبات را کاهش می دهد. در این صورت با افزایش شعاع کره موفین-تین اتم سبک باید دو پارامتر G_{max} و RK_{max} بهینه شوند.

دنباله 0 0 2 0 2 2 4 0 4 2 4 4 ترکیبات مختلف LM در بسط پتانسیل و چگالی را برای اتم غیر یکسان اول نشان می دهد. دنباله 0 0 1 0 2 0 2 2 3 0 3 2 4 0 4 2 4 4 ترکیبات مختلف LM در بسط پتانسیل و چگالی را برای اتم غیر یکسان دوم نشان می دهد. در این مثال حد بالای $L=4$ اختیار شده است. ترکیبات LM اتم اول با اتم دوم تفاوت دارد. علت این تفاوت آن است که گروه نقطه ای اتم اول با گروه نقطه ای اتم دوم تفاوت دارد. تعداد ترکیبات LM اتم اول کمتر از تعداد ترکیبات LM اتم دوم است. کمتر بودن تعداد ترکیبات LM اتم اول گویای آن است که تعداد عناصر تقارنی گروه نقطه ای اتم اول بیشتر از تعداد عناصر تقارنی گروه نقطه ای اتم دوم است. تعداد ترکیبات LM در کمترین تقارن برای $L=4$ به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$\sum_{L=0}^4 (2L+1) = 1+3+5+7+9 = 25$$

ذکر این نکته مفید است که یک حد بالا برای تعداد ترکیبات در برنامه وجود دارد. این حد بالا با پارامتر NCOM قابل تغییر است. پارامتر NCOM به صورت زیر تعریف می شود:

$$NCOM + 3 > n_{L,M=0} + 2n_{L,M>0} = n_{L,M=0} + n_{L,M \neq 0}$$

که در آن n تعداد ترکیبات LM را نشان می دهد و $NCOM=91$ در برنامه وین اختیار شده است. برنامه SYMMETRY گروههای نقطه ای هریک از نقاط شبکه، عملگرهای تقارنی متناظر با هر گروه نقطه ای، و مقادیر LM نمایش هماهنگهای شبکه را بر اساس نوع شبکه و موقعیتهای اتمی داده شده تعیین می کند. ترکیبات LM گروه مکعبی در جدول زیر آورده شده است.

جدول 3-5: ترکیبات LM گروه مکعبی.

تقارن	ترکیبات LM
23	00, 40, 44, 60, 64, -32, 62, 66, -72, -76, 80, 84, 88, -92, -96, -94, -98, 100, 104, 108, 102, 106, 1010
M3	00, 40, 44, 60, 64, 62, 66, 80, 84, 88, 100, 104, 108, 102, 106, 1010
432	00, 40, 44, 60, 64, 80, 84, 88, -94, -98, 100, 104, 108
-43M	00, 40, 44, 60, 64, -32, -72, -76, 80, 84, 88, -92, -96, 100, 104, 108
M3M	00, 40, 44, 60, 64, 80, 84, 88, 100, 104, 108

جدول ترکیبات گروه های غیر مکعبی در کتابچه وین وجود دارد. توصیه می شود که از ورودی case.in2 تولید شده توسط خود برنامه (بدون اعمال تغییر) استفاده شود. تغییرات در خطوط 1، 2 و 3 با هدف معین بهتر است پس از پایان حل خودسازگار انجام شود. مثلا تغییر TOT در خط اول case.in2 به FOR برای اضافه کردن نیروی پاولی به نیروهای قبلا محاسبه شده در ابتدای حل خودسازگار جز اتلاف وقت منفعت بیشتری ندارد. در نظر گرفتن نیروی پاولی بدون اتلاف وقت امکان پذیر است، اگر پس از حصول همگرایی مطلوب با کلید TOT فقط یک چرخه با کلید FOR انجام شود. کلیدهای EFG (گرادیان میدان الکتریکی) و QTL (بارهای جزئی) خاصتر هستند، به این معنی که پس از حصول همگرایی مطلوب با کلید TOT فقط اجرای برنامه LAPW2 با کلید EFG یا QTL لازم است. تغییر تعداد الکترونهاى والانس در خط دوم فقط در صورت استفاده از روش مغزه باز (open core) معنی دارد. تغییر انرژی Emin در خط دوم فقط در صورت علاقه مند بودن به الکترونهاى یک ناحیه خاص اهمیت دارد. مثلا محاسبه گرادیان میدان الکتریکی ناشی از الکترونهاى ظرفیت با تغییر Emin از 9.0- به 1.0- و تغییر کلید TOT به EFG و سپس فقط اجرای برنامه LAPW2 انجام می شود. به این ترتیب گرادیان میدان الکتریکی الکترونهاى شبه مغزه از کم کردن گرادیان میدان الکتریکی الکترونهاى ظرفیت از گرادیان میدان الکتریکی کل به راحتی قابل حصول است.

آنالیز گرادیان میدان الکتریکی در مثال bct-In و تاثیر Emin بر مقادیر محاسبه شده گرادیان میدان انجام شده است:

http://www.wien2k.at/reg_user/faq/efg.pdf

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 اجرای 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 $X = X_r(r)X_{ls}(\vec{l}, \vec{s})$ متغیرهای زاویه ای و شعاعی آن از هم جدا شوند. ورودیهای این برنامه case.struct, case.indm, case.vsp, case.inso, case.vector(so), case.energy و case.weight و خروجیهای آن case.outputdm, case.dmat, case.scfdm 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، $(l,s)\text{-index} = X_{ls}(\vec{l}, \vec{s})$ ، 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 موفین-تین اتم مورد نظر.

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

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

RINDEX=1 LSINDEX=3 : $\langle X \rangle$ = تصویر ممان مداری درون کره موفین-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 مثلاً می توان تعداد الکترونها درون کره موفین-تین یک اتم را به صورت زیر با اختیار $(l,s) - index = 1$, $r - index = 1$ حساب کرد(!!!):

-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.indm به جای case.indmc نشان می دهد که محاسبات در حضور جفت شدگی اسپین-مدار انجام شده است (-dn) -up -so -c lapwdm -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 موفین-تین اتم مورد نظر (اتم اول). ستون دوم اربیتالهای s, p, d و f اتم اول را نشان می دهد. ستونهای بعدی تعداد الکترونها درون کره موفین-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 الکترونها اربیتالهای s, p, d و f اتم اول را نشان می دهد. جمع اعداد

ستون آخر (14.56035) باید با تعداد کل اکترونها درون کره موافق-تین اتم اول مساوی باشد. از طرفی می دانیم که تعداد کل اکترونها درون کره موافق-تین را می توان از جمع تعداد اکترونها اسپین بالا و اکترونها 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 ، برحسب 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 اکترونها با اسپین بالا و اکترونها 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 الکترونیهای 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.

LCORE

برنامه LCORE نسخه تصحیح شده یک کد اتمی است. این کد با استفاده از تقریب LSDA در معادله دیراک-فوک به حل کاملاً نسبیتی الکترونیهای مغزه (با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین-مدار) و یا حل غیر نسبیتی اگر NERL در `case.struct` تصریح شده باشد می پردازد [J. P. Desclau]. می پردازد. ورودیهای این برنامه `case.struct`، `case.inc`، `case.vsp` و خروجیهای آن `case.outputc`، `case.scfc`، `case.clmcor` اند. بخش کروی پتانسیل تولید شده `case.vsp` توسط برنامه LAPW0 در هر مرحله به عنوان ورودی مورد استفاده قرار می گیرد. برنامه LCORE مقادیر ویژه، `case.clmcore`، چگالیهای متناظر الکترونیهای مغزه و سهم الکترونیهای مغزه در نیروهای اتمی را به دست می دهد. نمونه ای از ورودی `case.inc` به صورت زیر است:

```
4 0.0      # of orbitals, shift of potential
1,-1,2    n (principal quantum number), kappa, occup. number
2,-1,2    2s
2,-2,4    2p
2, 1,2    2p*
1 0.0      # of orbital of second atom
1,-1,2    1s
0          end switch
```

ساختار ورودی case.inc شبیه به وردی اصلی برنامه LSTART یعنی case.inst است. برنامه های LSTART و LCORE نیز دارای یک ریشه اتمی و بسیار شبیه به یکدیگرند. پس در اینجا فقط به تفاوت ورودی case.inc با ورودی case.inst می پردازیم. جابه جایی انرژی پتانسیل در خط اول (0.0) برای اعمال روش مغزه باز open core اندیشیده شده است. در صورت استفاده از روش مغزه باز باید مقدار غیر صفر مناسب برای این جا به جایی به دست آورده شود. توصیف خطوط بعدی عینا همان است که در مورد case.inst قبلا ارایه شد. برخلاف case.inst که در آن اسپین الکترونها از هم تفکیک شده بودند در case.inc الکترونها اسپین بالا و پایین با هم در نظر گرفته شده اند.

MIXER

برنامه MIXER چگالیهای الکترونی الکترونها مغزه، شبه مغزه، و ظرفیت را با هم جمع می کند. این چگالیهها 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 چگالیهها 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. دو روش 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) مثلا (0.01) به ویژه برای دستگاه های مغناطیسی توصیه می شود. در زیر ورودی case.inorb مجددا به منظور تاکید بیشتر آورده شده است:

PRATT, 1.0

1 1 2
2 1 2
1
0.59 0.07
0.59 0.07

mixmod, amix

iatom nlorb, lorb
iatom nlorb, lorb
nsic (LDA+U(SIC) used)
U J
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.

جدول: ورودیها و خروجیهای ضروری و اختیاری برنامه های مرحله حل خودسازگار.

برنامه ها	ورودیهای		خروجیهای	
	ضروری	اختیاری	ضروری	اختیاری
LAPW0	Lapw0.def	case.clmup/dn	case.output0	case.r2v
	case.struct		case.scf0	case.vcou1
	case.in0		case.vsp(up/dn)	
	case.clmsum		case.vns(up/dn)	
ORB	orb.def	case.scf1	case.outputorb	case.br1orb
	case.struct	case.vorb_old	case.scforb	case.br2orb
	case.inorb		case.vorb	case.weigh
	case.dmat		orb.error	
	case.vsp			
LAPW1	lapw1.def	case.vns	case.output1(s)	case.nsh(s)
	case.struct	case.klist	case.scf1(s)	
	case.in1		case.vector(s)	
	case.vsp		case.energy	
LAPW50	lapwso.def			
	case.struct		case.outputso	case.vectorso
	case.inso		case.scfso	case.vectordum
	case.vector	case.norm	lapwso.error	
	case.vsp			
	case.energy			
LAPW2	lapw2.def	case.kgen	case.output2(s)	case.qtl(s)
	case.struct	case.nsh(s)	case.scf2(s)	case.weight
	case.in2(s)	case.weight	case.clm[val sc]	case.weigh
	case.vector(s)	case.weigh	case.help3*	
	case.vsp			
	case.energy			
LAPWDM	lapwdm.def	case.inso	case.outputdm	

	case.struct		case.scfdm	
	case.indm		case.dmat	
	case.vector		lapwdm.error	
	case.vsp			
	case.weigh			
	case.energy			
SUMPARA	case.struct	case.scf2p	case.outputsum	
	case.clmval		case.clmval	
			case.scf2	
LCORE	lcore.def	case.vns	case.outputc	case.corewf
	case.struct		case.scfc	
	case.inc		case.clmcor	
	case.vsp		lcore.error	

بعد از LCORE فایل های **case.scf x** به فایل **case.scf** ضمیمه می شوند و همچنین،

فایل **case.clmsum** به فائل **case.clmsum_old** تغییر نام می یابد

MIXER	mixer.def	case.clmsum_old	case.outputm	case.broyd1
	case.struct	case.clmsc	case.scfm	case.broyd2
	case.inm	case.clmcor	case.clmsum	
	case.clmval	case.scf	mixer.error	
		case.broyd1		
		case.broyd2		

بعد از MIXER فایل **case.scfm** به فایل **case.scf** ضمیمه می شود

بنابراین

پس از پایان یک چرخه دو فایل عمده عبارتند از **case.scf** و **case.clmsum**