بسمه تعالي

**کارگاه پیشرفته‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی**

**محاسبه‌ی خواص بلورهای اپتیکی**

# محاسبات ساختار الکترونی با بسته‌ی محاسباتیِ اکسایتینگ

**گرد آورنده:**

**سید محمدحسین مدرسی، حسین کریمی**

**(دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان)**

**۲۲ و ۲۳ آبان ۹۷**

## فهرست مطالب


**۱- انجام محاسبه‌ی خودسازگار حالت پایه LiF ..... ۱**

**۲- فایلهای خروجی در اکسایتینگ ..... ۲**

**۳- رسم چگالیِ حالات (DOS) ..... ٤**

**٤- رسم ساختارِ نواری ..... ٦**


**هدف:** در این درس‌نامه نحوه‌ی انجام محاسبات ساختار نواری و چگالی حالات برای عایق LiF بیان می‌شود. روش کار بدین صورت است که ابتدا محاسبات خودسازگار برای بدست آمدن چگالی حالت پایه انجام می‌شودو پس از همگرا شدن نتایج، محاسبه چگالی حالات و ساختار نواری انجام می‌شود.

## ۱- ساختار الکترونیِ LiF: انجام محاسبه‌ی حالت پایه

برای شروع محاسبات ساختار الکترونی ابتدا یک محاسبه‌ی حالت پایه باید انجام گیرد به منظور انجام این محاسبه، محتویات زیر در یک فایل با نام input.xml در پوشه‌ی کار شما قرار داده شده است. با دستور زیر در ترمینال، وارد آن شوید:

```
cd ~/Desktop/workshop/day1/dos-band_LiF
gedit input.xml
```

محتویات فایل به شکل زیر قابل مشاهده است:

```
<input>

  <title>LiF</title>

  <structure speciespath="$EXCITINGROOT/species">

    <crystal scale="7.6820">
      <basevect>0.0   0.5   0.5</basevect>
      <basevect>0.5   0.0   0.5</basevect>
      <basevect>0.5   0.5   0.0</basevect>
    </crystal>

   <species speciesfile="Li.xml"  rmt="1.6">
      <atom coord="0.00 0.00 0.00"/>
    </species>
   <species speciesfile="F.xml"  rmt="1.6">
      <atom coord="0.5 0.5 0.5"/>
    </species>
```

```
  </structure>

  <groundstate
    do="fromscratch"
    rgkmax="7.00"
    ngridk="6 6 6"
    gmaxvr="14"
    outputlevel="high"
    xctype="GGA_PBE">
  </groundstate>

</input>
```

توجه: فراموش نکنید که در فایل input.xml با استفاده از دستور زیر، عبارت $EXCITINGROOT را با مقدار واقعی متغیر محیطی $EXCITINGROOT جایگزین کنید:

```
SETUP-excitingroot.sh
```

پس از این کار، محاسبه حالت پایه را با اجرای دستور زیر در پوشه LiF آغاز نمایید:

```
excitingser input.xml
```

در حین محاسبه فایل‌های خروجی ساخته می‌شوند که شامل تمام اطلاعات مربوط به سیستمِ ماده شما و خود محاسبه هستند. برخی از فایل‌های خروجی ممکن است قبلا در ابتدای محاسبه ساخته شده باشند و در حین اجرا دیگر تغییر نکنند. فایل های خروجی ساخته شده توسط اکسایتینگ در یک محاسبه استاندارد حالت پایه در بخش بعد توضیح داده شده‌اند.

## ۲- فایلهای خروجی در اکسایتینگ

فایل خروجی اصلی در اکسایتینگ INFO.OUT است. توضیح مفصلی از محتوای این فایل را می توان در درس‌نامه‌ی شماره‌ی یک مشاهده کرد.

| نام فایل | توضیح |
|---|---|
| INFO.OUT | فایل خروجی اصلی که شامل اطلاعات اصلی مربوط به ساختارِ ماده، پارامترهای محاسباتی، نتایج (انرژی کل، سهم‌های انرژی، سهم‌های بار، نیروهای اتمی، انرژی فرمی ...) مربوط به هر چرخه و برخی موارد دیگر است. مقدار اطلاعات موجود در این فایل را می توان با استفاده از عبارت outputlevel در بخش groundstate تنظیم کرد. |

فایلهای دیگری که در هنگام انجام محاسبات SCF ساخته می‌شوند را به طور کلی در ادامه معرفی می‌کنیم:

| نام فایل | توضیح |
|---|---|

| | |
|---|---|
| TOTENERGY.OUT | انرژی کل بر حسب هارتری [Ha]؛ هر خط متناظر با یک چرخه SCF است |
| EFERMI.OUT | انرژی فرمی بر حسب هارتری [Ha] در آخرین چرخه SCF |
| RMSDVEFF.OUT | ریشه میانگین مربعی انحراف در پتانسیل موثر؛ هر خط در آن نشانگر یک چرخه SCF است که از دومین چرخه شروع شده و آخرین چرخه SCf را نیز در نظر نمی گیرد. |
| DFSCFMAX.OUT | بیشترین تغییرات بخش IBS در نیروهای اتمی؛ هر خط در آن متناظر با یک چرخه SCF است، که از دومین چرخه شروع شده و آخرین چرخه SCF را در نظر نمی‌گیرد. تنها زمانی نوشته می‌شود که نیروها به طور صریح محاسبه شده باشند (مثلا برای واهلش اتمی ((relaxation). |
| EIGVAL.OUT | ویژه مقادیر (انرژی‌های) نوارهای ظرفیت برای هر نقطه k و نوار |
| EVALCORE.OUT | ویژه مقادیر انرژی (ترازهای انرژی) مربوط به حالت‌های مغزه |
| LINENGY.OUT | انرژی‌های خطی‌سازی همانطور که در فایل گونه‌ها تنظیم شده‌اند (اگر در فایل species.xml انرژی خطی سازی مربوطه بصورت "searchE = "false باشد) و یا توسط اکسایتینگ تعیین شده‌اند (اگر در فایل species.xml انرژی خطی سازی مربوطه بصورت "searchE = "true باشد) |

سایر فایل‌های خروجی، شامل اطلاعات ساختاری، تقارن ها و غیره هستند:

| نام فایل | توضیح |
|---|---|
| LATTICE.OUT | اطلاعات مربوط به شبکه: بردارهای بسیط شبکه، حجم سلول واحد، بردارهای شبکه وارون، و غیره |
| SYMCRYS.OUT | اطلاعات مربوط به عملگرهای تقارنیِ بلور؛ اطلاعات تقارنی بیشتر در فایل های SYMT2.OUT، SYMSITE.OUT، SYMMULT.OUT، SYMLAT.OUT، SYMINV.OUT، و SYMINV.OUT موجودند. |
| KPOINTS.OUT | فهرست نقاط k، مختصات آنها (بر حسب واحد بردارهای شبکه وارون)، وزنها، اندازه ماتریس |
| BONDLENGTH.OUT | فاصله های بین اتمی؛ مناسب برای بررسی درست بودن فایل ورودی |
| EQATOMS.OUT | اطلاعات مربوط به برابری اتم ها به دلیل تقارن بلوری |

فایل‌های خروجی به فرمت XML مناسب برای ذخیره داده، پایگاه داده و غیره هستند:

| نام فایل | توضیح |
|---|---|
| atoms.xml | نتایج محاسبات انجام شده برای اتمها به منظور آغاز کردن چگالی الکترونی |
| info.xml | اطلاعات موجود در این فایل مشابه با اطلاعات نوشته شده در فایل INFO.OUT است اما به فرمت XML نشان داده می‌شود. |
| geometry.xml | اطلاعات ساختاری مربوط به سیستم. این اطلاعات اغلب با بخش **structure** در فایل ورودی شما یکسان است، اما ممکن است در تنظیمات مشخصی در عبارتهای **structure** متفاوت باشد. مثلا ممکن است **primcell** = **"true"** باشد یا **tshift** = **"true"**. |

برخی از فایلهای خروجی به طور مستقیم قابل خواندن نیستند، زیرا بصورت فایل‌های binary نوشته شده اند. این فایل‌ها زمانی مهم هستند که بخواهیم یک محاسبه موجود را مجددا شروع کرده و یا گسترش دهیم.

| نام فایل | توضیح |
|---|---|
| EVALFV.OUT | ویژه مقادیر وردشی اول |
| EVALSV.OUT | ویژه مقادیر وردشی دوم |
| EVECFV.OUT | ویژه بردارهای وردشی اول |
| EVECSV.OUT | ویژه بردارهای وردشی دوم |
| OCCSV.OUT | عدد اشغال حالتهای وردشی دوم |
| STATE.OUT | توزیع چگالی و پتانسیل در فضای حقیقی |

## ۳- رسم چگالیِ حالات (DOS)

پس از تکمیل شدن اجرای حالت پایه و بدست آوردن انرژی کل مربوطه، اکنون می توانید برای بدست آوردن ویژگی‌های بیشتری از سیستم اقدام کنید. یکی از اساسی‌ترین این ویژگی‌ها چگالی حالات (DOS) است. نمودار چگالی حالات می‌تواند اطلاعاتی در مورد نوارهای انرژی سیستم در اختیارمان قرار دهد. برای انجام این محاسبه، باید تغییرات ساده زیر را در فایل ورودی input.xml اعمال کنید:

۱- عبارت do = "skip" را به بخش groundstate اضافه کنید

۲- بخش properties را پس از بخش groundstate اضافه کنید

۳- زیربخش dos را به بخش properties اضافه کنید

۴- عبارت nsmdos = " 1" را به زیربخش dos اضافه کنید

با اعمال این تغییرات input.xml به صورت زیر در می‌آید:

```
...
<groundstate
do="skip"
rgkmax="7.00"
ngridk="6 6 6"
gmaxvr="14"
outputlevel="high"
xctype="GGA_PBE">
</groundstate>
<properties>
<dos
nsmdos="1">
</dos>
</properties>
...
```

برای راحتیِ کار، بخشی که برای انجام محاسباتِ چگالی حالات باید به فایل ورودی اضافه شود در پوشه‌ی کار شما (dos-band_LiF) در فایلی با نام section-dos قرار داده شده است. با کپی کردن این قسمت در فایل ورودی، دقیقاً بعد از بخش <groundstate/> دستور زیر را برای اجرای محاسبات dos در خط فرمان ترمینال وارد کنید:

```
excitingser input.xml
```

این بار، برنامه فایل‌های زیر را تولید می کند:

| نام فایل | توضیح |
|---|---|
| TDOS.OUT | چگالی حالات کل |
| dos.xml | چگالی حالات کل ذخیره شده به فرمت XML |

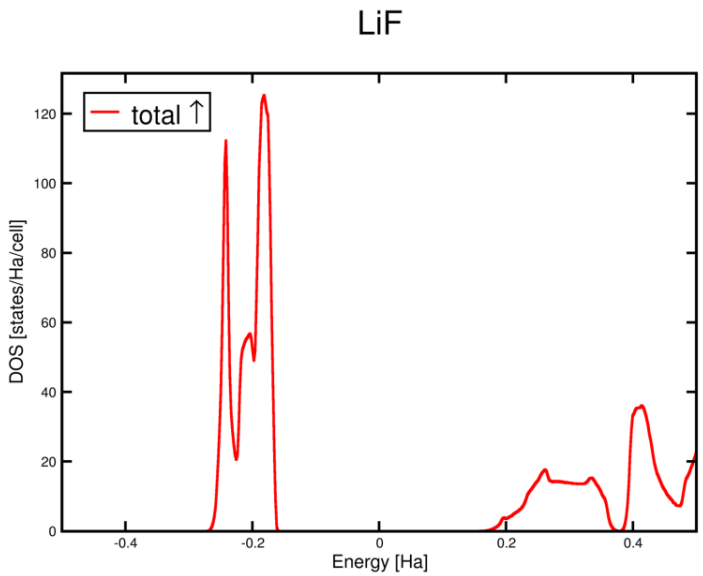
برای مشاهده نمودار DOS دستور زیر را اجرا نمایید:

```
xsltproc $EXCITINGVISUAL/xmldos2grace.xsl dos.xml > LiF_dos.agr
```

این دستور فایل LiF_dos.agr را برای xmgrace تولید می کند. می‌توانید آنرا با فرمان زیر باز کنید:

```
xmgrace LiF_dos.agr
```

نتیجه به شکل زیر نمایش داده می‌شود:




توجه داشته باشید که در این محاسبات انرژیِ فرمی بر صفر منطبق شده است.

## ۴- رسم ساختارِ نواری

برای انجام محاسبه ساختار نواریLiF، بخش زیر را دقیقا بعد از بخش </groundstate> در فایل ورودی وارد کنید:

(عبارتی که برای محاسبه‌ی dos قرار دادید را حذف کنید.)

```
...
  <properties>
    <bandstructure>
     <plot1d>
       <path steps="100">
         <point coord="0.750   0.500   0.250" label="W"    />
         <point coord="0.500   0.500   0.500" label="L"    />
         <point coord="0.000   0.000   0.000" label="GAMMA"/>
         <point coord="0.500   0.500   0.000" label="X"    />
         <point coord="0.750   0.500   0.250" label="W"    />
         <point coord="0.750   0.375   0.375" label="K"    />
       </path>
     </plot1d>
   </bandstructure>
  </properties>
...
```

در اینجا نیز برای راحتیِ کار، محتوات فوق در فایلی با نام section-band در پوشه‌ی کار شما قرار داده شده است.

اکنون یک بار دیگر دستور زیر را وارد کنید:

```
excitingser input.xml
```

بعد از پایان محاسبات فایل bandstructure.xml ساخته می‌شود که می‌توانید با دستور زیر فایل xmgrace آن را ایجاد کنید:

```
xsltproc $EXCITINGVISUAL/xmlband2agr.xsl bandstructure.xml
```

اکنون فایل LiF_bandstructure.agr را برای xmgrace ایجاد کرده ایم، که می توانید آنرا باز کرده و به کمک xmgrace ویرایش کنید:

```
xmgrace LiF_bandstructure.agr
```

نتیجه به شکل زیر خواهد بود: