



راهنمای کامل
انجام حساب‌های حالت جامد (PBC)
بنا بر افزایش گاو سینه

گروه پزشکی

پروفسور گوستاوو سبیریا

دانشگاه رایس آمریکا

ترجمه

دکتر اسدالله بشرا

عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد بروجرد

سرشناسه	: سوسریا، گوستاوو، ۱۹۵۶ - م.
عنوان و نام پدیدآور	: Scuseria, Gustavo راهنمای کامل انجام محاسبه‌های حالت جامد (PBC) یا نرم‌افزار گاوسین گروه پژوهشی پروفیسور گوستاو و سوسریا: ترجمه اسدالله بشرا.
مشخصات نشر	: تهران: انتشارات آنگاه، ۱۳۹۵.
مشخصات ظاهری	: ۱۴۵ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰-۹۴۷۴۵-۰۰-۹: ریال: ۱۰۰۰۰۰
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: عنوان اصلی: PBC calculations Solid state calculations using gaussian: definitive guide to g-۹
موضوع	: نرم‌افزار گاوسی
موضوع	: اوربیتالهای مولکولی -- داده‌پردازی
موضوع	: فرایندهای گاوسی -- برنامه‌های کامپیوتری
شناسه نزوده	: بشرا، اسدالله، ۱۳۵۲ -، مترجم
رده بندی کنگره	: ۵۴۱/۲۸۰۲۸۵: ۱۳۹۴/QD۴۰۲ س۹/۵۲ ۶
رده بندی دیویر	: ۵۴۱/۲۸۰۲۸۵
شماره کتابشناس ملی	: ۳۹۳۷۲۸۷



راهنمای کامل انجام محاسبه‌های حالت جامد (PBC) با نرم‌افزار گاوسین

گروه پژوهشی

پروفیسور گوستاوو سوسریا

دانشگاه رایس آمریکا

مترجم: دکتر اسدالله بشرا

چاپ نخست: ۱۳۹۵

شمارگان: ۲۰۰۰ نسخه

طراحی جلد و صفحه‌آرایی: عبدالرضا (شاهین) بشرا

همه‌ی حقوق این کتاب برای ناشر آن محفوظ است.

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۹۴۷۴۵-۰۰-۹

تهران. شهرک اکباتان. فاز دو. بلوک ۳. ورودی ۵. طبقه ۴. واحد ۴۲

تلفن: ۴۴۶۷۳۹۲۴ ۰۲۱

فهرست

۱ درباره‌ی این نوشتار

۱-۱ مثال‌ها

۲-۱ چند نمونه‌ی دیگر فایل ورودی

۲ استفاده از پایگاه داده‌ی ICSD

۱-۲ جستجوی یک ساختار در ICSD

۲-۲ ذخیره کردن فایل‌های cif

۳-۲ یک نمونه فایل CIF

۴-۲ باز کردن فایل CIF در نرم‌افزار گائوس ویو

۵-۲ ذخیره‌ی یک فایل کار: 'گاو' بین که از cif آماده شده

۳. فایل‌های ورودی PBC

۱-۳ مثالی از یک فایل ورودی

۲-۳ محاسبه‌های تک نقطه‌ای انرژی PBC

۱-۲-۳ دستورهای لینک 0

۲-۲-۳ بخش Route: سطرهای ۱-۳

۳-۲-۳ بخش عنوان و مشخصات مختصات ساختار (Coordinate Specifications)

۳-۳ بهینه‌سازی ساختار فضایی

۱-۳-۳ توضیحات سطر به سطر

۴-۳ بهینه‌سازی ساختار فضایی به طور مقید

۵-۳ انجام دوباره‌ی محاسبه‌ها

۴ محاسبه‌های تخمین ویژگی ضد فرومغناطیسی

۴-۱ فایل ورودی

۴-۲ نمونه‌ی ۱: H Triplet $\rightarrow$ Singlet

۴-۳ اطلاعات موجود در فایل خروجی

۴-۴ نمونه‌ی ۲: Cr Triplet $\rightarrow$ Singlet

۴-۵ نمونه‌ی ۳: LaTiO₃ Ti Quintuplet $\rightarrow$ Singlet

۵ محاسبه‌های ممان مغناطیسی متغیر

۵-۱ ورودی

۵-۲ خروجی

۵-۳ نمونه‌ی ۱: تک‌شسته‌ی خطی Pd

۵-۴ نمونه‌ی ۲: اورانیوم پیرید

۶ محاسبه‌های اسپین-اوربیت و پراش

۶-۱ نمونه‌ی ۱: Ge با استفاده از ECP

۶-۲ نمونه‌ی ۲: Hg با استفاده از ECP

۶-۳ محاسبه‌های پراش

۷ انجام محاسبه‌های ساختار نواز و PDOS

۷-۱ مورد معمول: انجام همزمان PDOS و BS به‌طور همزمان

۷-۲ انجام محاسبه‌ی PDOS به‌تنهایی

۷-۲-۱ مثال‌هایی برای فایل ورودی

۷-۲-۲ فایل خروجی PDOS

۷-۳ انجام محاسبه‌ی BS به‌تنهایی

۷-۳-۱ مثالی از فایل ورودی

۷-۳-۲ فایل های خروجی

۷-۴ به دست آوردن BS/PDOS در ادامه

۷-۵ توضیح های مفصل IOP های BS/PDOS

۸. تقارن

۸-۱ مثالی از فایل band.inp

۸-۲ تعیین SFC برای سیستم های سه بعدی

۸-۳ قطعه/فیلیم های دورانی

۸-۴ تک لایه های یک بعدی

۹ رسم نمودار BS و PDOS

۹-۱ یک نمودار PDOS پایه

۹-۲ یک مثال از فایل PDOS به صورت نمودار

۹-۳ رسم ساختار نوار

۹-۳-۱ استفاده از gpband برای رسم BS

۹-۳-۲ خروجی پیش فرض gpband

۹-۳-۳ فایل پیش فرض حاشیه نویسی شده ی gp

۹-۳-۴ خروجی BS بهبود یافته

۹-۴ تعیین k-point ها

۹-۴-۱ شکاف های غیرمستقیم آسان

۹-۴-۲ شکاف های خاص

۱۰ بالابردن دقت و کارایی محاسبه های PBC

۱۰-۱ نکته های کاربردی برای محاسبه های PBC با گاوسین

۲-۱۰ تابع‌های نفوذ

۳-۱۰ تمام کلیدواژه‌های PBC

۱-۳-۱۰ توضیح

۲-۳-۱۰ انتخاب‌های اختیاری (Options)

۳-۳-۱۰ کاربردپذیری

۱۱ اسکریپت‌ها

۱-۱۱ الگوی عمودی PDOS

۲-۱۱ الگوی افقی PDOS

۳-۱۱ ساختار نوار: فایل‌های فرض gband

۴-۱۱ ساختار نوار: فایل‌های تصحیح‌شده‌ی gpt مربوط به AISb (HISS)

۵-۱۱ مثال چند نمودارهای DOS و PDOS

۱-۵-۱۱ سرنویس و آماده‌سازی نمودارها

۲-۵-۱۱ نمودار ساختار نوار

۳-۵-۱۴۱ نمودار II ساختار نوار

۴-۵-۱۱ نمودار I چرخش یافته‌ی PDOS

۵-۵-۱۱ نمودار II چرخش یافته‌ی PDOS

۱۲ تابعی‌های PBC

۱-۱۲ تابعی‌های سوسریا

۲-۱۲ تابعی‌های تنها-برای-جامد

۳-۱۲ تابعی‌های شبه‌موضعی

۴-۱۲ هیبریدهای جهانی

۱۳ سری پایه برای سیستم‌های پیشرفته‌تر

۱-۱۳ مثال: سری پایه‌ی 6-311 برای فلونور

۱۳-۲ اصلاح سری پایه‌ها برای محاسبه‌های PBC

۱۳-۲-۱ پایگاه داده‌های سری پایه‌ها

۱۳-۲-۲ مثال ۱: سری پایه‌های PBC اصلاح شده‌ی بدون ECP

۱۳-۲-۳ مثال ۲: سری پایه‌ی اصلاح شده‌ی آرسنیک با ECP

۱۳-۲-۳ مثال ۳: اصلاح گام‌به‌گام برای CI

۱۳-۳ استفاده از EMSI

۱۳-۳-۱ مثال Ge

۱۳-۴ تبدیل فایل‌های cry + gbs: gbsutil

۱۴ ساختن نسخه پشتیبان برای فایل‌ها

۱۴-۱ استفاده از دستور: مثال‌ها

آب کم جو، تشنگی آور به دست ...
(مولوی)

دیباچه‌ی مترجم

مهم‌ترین دلیلی که مرا بر آن داشت - پس از بیش از پانزده سال پژوهش، با نرم‌افزار گاوسین - این کتاب کاربردی و سودمند را در حوزه‌ی سیم‌فیزیک/ فیزیک‌شیمی محاسباتی به فارسی ترجمه کنم این مساله است که تا زمان چاپ این ترجمه، متأسفانه به دلیل تحریم، دانشگاه‌های ایران به‌طور مستقیم و رسمی نمی‌توانند نرم‌افزار گاوسین را با مجوز معتبر از شرکت مربوطه خریداری کنند. در نتیجه نمی‌توانند مشکلات نرم‌افزار را - چه در هنگام نصب نسخه‌هایی از آن که محاسبه‌های موازی را انجام می‌دهند و چه در خود محاسباتی که انجام می‌دهند - با گروه پشتیبانی شرکت گاوسین در میان بگذارند و آن‌ها را رفع کنند. همانگونه که آگاه هستید، نسخه‌های جدید، تنها به اصلاحات مربوط به الگوریتم انجام محاسبه‌ها و بهبود سرعت انجام محاسبه‌ها یا رفع اشکال از کدهای برنامه‌ی نسخه‌های پیشین گاوسین محدود نمی‌شود؛ بلکه در نسخه‌های جدیدتر گاوسین ممکن است محاسبه‌های جدیدتری که در نسخه‌های پیشین موجود نبود گنجانده شود. به‌عنوان نمونه همین محاسبه‌های فاز جامد که در

نسخه‌های 09 نرم‌افزار گاووسین گنجانده شده است در نسخه‌های پیش از 09 موجود نیست. با ترجمه‌ی این کتاب چند مساله تا حدودی حل می‌شود. یکی آن‌که درست است که این کتاب برای محاسبه‌ها در حالت جامد نگاشته شده است اما برخی راهکارهایی که در متن آن برای محاسبه‌ها می‌آید می‌تواند در محاسبه‌های حالت‌های گازی و محلول هم راهگشا باشد. البته این وجه در صورتی برای خواننده سودمند خواهد بود که در کار با نرم‌افزار گاووسین تجربه‌ی کافی داشته باشد. دوم آن‌که برخی نکته‌های بیان شده در متن کتاب که برای محاسبه‌های حالت جامد با نرم‌افزار گاووسین آورده شده‌اند نکته‌هایی کلی هستند که برای کسانی که با نرم‌افزارهای دیگری نیز در فاز جامد کار و پژوهش می‌کنند می‌تواند سودمند باشد. و نکته‌ی سوم این‌که با توجه به معرفی کردن پژوهشگرانی از گروه پژوهشی پروفیسور سوسیریا در متن کتاب برای رفع مشکلات محاسبه‌های مربوط به این کتاب؛ کسانی در ایران که در کار با نرم‌افزار گاووسین تا اندازه‌ای مهارت داشته باشند، پرسش‌ها و مشکلاتی در کار با گاووسین داشته باشند شاید بتوانند به‌طور ضمنی پرسش خود را از یک فرد گروه پژوهشی سوسیریا بپرسند تا از گروه پشتیبانی گاووسین که از شما مجوز معتبر نرم‌افزار را درخواست می‌کند. ضمن این‌که زمان پاسخ دادن گروه پشتیبانی گاووسین به پرسش‌ها ممکن است تا بیش از یک ماه هم به طول بیانجامد!

اما تنها اهمیت و کاربردی بودن این کتاب در کار با نرم‌افزار گاووسین - که خود یکی از پرکاربردترین نرم‌افزارها به‌ویژه برای محاسبه‌های در فاز گازی و فانت محلول است - نبود بلکه یادآوری چند نکته‌ی بسیار مهم بود که در حوزه‌ی آموزش و پژوهش در شیمی فیزیک محاسباتی به ذهن‌ام خطور کرد. متأسفانه وجه محاسباتی و کار با نرم‌افزار در حوزه‌ی شیمی فیزیک/ فیزیک شیمی محاسباتی این خیال را در برخی به باور تبدیل کرده است که امر، آسان‌تر از آن است که می‌نماید! بر این اساس باز هم متأسفانه برخی مدرسان در دانشگاه‌ها به جای پرداختن به تئوری‌ها در شیمی فیزیک محاسباتی که بنیان‌های کوانتوم را در پرداختن به حل مساله‌های کاربردی شیمی و فیزیک تشریح می‌کند و به کاربردهای آن در محاسبه‌ها می‌پردازد، به آموزش

نرم افزارهای! این حوزه‌ها- که گائوسین یکی از آنها است - در سطوح کارشناسی ارشد و دکتری می‌پردازند، تا آن‌که وجه تئوری و سپس کاربردی آن را به آموزش و بحث بگذارند. به نظر می‌رسد که باید بازنگری جدی‌تری در رفتار آموزشی و پژوهشی‌مان در حوزه‌ی شیمی/ فیزیک محاسباتی باید داشته باشیم و با جدیتی که در دانشگاه‌های مطرح جهان در حوزه‌ی شیمی/ فیزیک محاسباتی وجود دارد به آن بپردازیم. نکته‌ی دوم آن است که برای پژوهش روشن‌بینانه، هدفمند و منطقی در حوزه‌ی شیمی/ فیزیک محاسباتی، گام اول دانستن مبانی کوانتومی مسأله‌ها است و تحلیل آن‌ها. پس از این گام‌ها است که کار با نرم‌افزار و کاربرد مبانی یاد شده اهمیت می‌یابد. متأسفانه برخی این ساز را از سر گشاد آن می‌نوازند و فکر می‌کنند با یاد گرفتن چند فرمان از یک نرم‌افزار تمام راه‌ها هموار شده است و به آسانی می‌توانند در این حوزه‌ی دشوار پژوهش کنند.

در ضمن یادآور می‌شود که تمام ترجمه‌ی این کتاب آخرین نسخه‌ی نرم‌افزار گائوسین، نسخه‌ی G09 D.01 است. به یاد داشته باشید که از هر نسخه‌ی جدید گائوسین که برای محاسبه استفاده می‌کنید حتماً یادداشت‌های منتشر شده مرتبط با آن نسخه را که در وبسایت رسمی گائوسین موجود است نیز مطالعه کنید. در این یادداشت‌ها مواردی مانند اصلاح‌های کدهای برنامه و فرمان‌های جدید نرم‌افزار، امکانات جدید تعبیه شده در آن و رفع مشکل‌های کدهای پیشین را خواهید دید که بسیار برای کار با نرم‌افزار سودمند است.

در پایان یادآوری می‌کنیم که در متن کتاب هر جا که به یک سایت، اینترنتی ارجاع داده شده بود مشخصات و آدرس آن سایت را در بخش مراجع آورده‌ایم تا خواننده به آسانی بتواند به آن سایت دسترسی پیدا کند. تمامی مراجع کتاب هم با نرم‌افزار Endnote تدوین شده است. در حالی که در اصل کتاب، تمام مراجع به صورت دستی نگاشته شده بود و این موجب شده بود در مواردی یک مرجع دو بار در بخش مراجع تکرار شود یا در مواردی خود مرجع دارای غلط باشد که تمام این موارد رفع اشکال شد. آدرس اینترنتی فایل‌هایی که در متن به آن‌ها ارجاع

داده شده بود تا خوانندگان آن‌ها را دانلود کنند به این دلیل که دسترسی به این فایل‌ها محلی بود یعنی تنها از دانشگاه رایس قابل دسترسی بود و نه برای خوانندگان این کتاب. حذف شد. بخشی که مربوط به خوشه‌ی محاسباتی دانشگاه رایس* و چگونگی انجام محاسبه‌های گاوسین بر روی آن و نیز کدهای گاوسین نصب‌شده بر روی آن بود نیز به دلیل عدم کاربرد برای خوانندگان این کتاب حذف شد.

اسدالله بشرا

دکترای شیمی فیزیک و استادیار دانشگاه

تهران- تابستان ۱۳۹۳