

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ
وَلِهُتَمَّ وَمَا يَنْبَغِي

آشنایی با

کد محاسباتی wien2k



دکتر محمدرضا علایی

نوید روهنده

دکتر اسماعیل عبدلی

(عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی ورامین)



انتشارات نظری

سرشناسه	: روئنده نوید، ۱۳۶۴
عنوان و نام پدیدآور	: آشنایی با کد محاسباتی wien2k ، نوید روئنده، اسماعیل عبدلی، حمیدرضا علانی
مشخصات نشر	: تهران: انتشارات نظری، ۱۳۹۵
مشخصات ظاهری	: ۷۹ صفحه
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰-۲۸۹-۳۶۴-۲
وضعیت فهرست‌نویسی	: فیا
یادداشت	: کتابنامه: ص. ۷۹.
موضوع	: کوانتوم — داده‌پردازی
موضوع	: کوانتوم — نرم‌افزار
موضوع	: کامپیوترها — شبیه‌سازی
شناسه زوده	: کوانتوم — شبیه‌سازی
شناسه افزوده	: عبدلی، اسماعیل، ۱۳۵۴ -
رده‌بندی کنگر	: دلی، حمیدرضا، ۱۳۴۶ -
رده‌بندی دیویی	: QC۱۷۴/۱۷/د۲۹، ۳۹۵
شماره کتاب‌شناسی می	: ۵۳/۱۲۰
	: ۴۱۰ ۵۷۰

نام کتاب: آشنایی با کد محاسباتی **wien2k**
 نویسندگان: اسماعیل عبدلی، نوید روئنده، حمیدرضا علانی (عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی ورامین)
 ویراستار علمی: دکتر محمد یونسی (عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد آیت‌الله آملی)
 حروف‌چینی و صفحه‌آرایی: نوید روئنده
 طراح جلد: حمیدرضا اسفنجانی
 نوبت چاپ: اول - ۱۳۹۵
 شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه
 شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۲۸۹-۳۶۴-۲



دفتر مرکزی: تهران، خیابان ولی‌عصر، خیابان سید جمال‌الدین اسفندیاری، نبش خیابان
 فتحی شقایق، پلاک ۳۲، طبقه ۲، واحد ۱۷

info@nashrenazari.com

www.nashrenazari.com

تلفن: ۸۸۱۰۲۷۷۵ فاکس: ۸۸۱۰۴۴۴۰ همراه: ۰۹۱۹۰۱۲۹۴۵۵

پیام کوتاه: ۳۰۰۰۸۹۰۷۷۷۷۷۸

قیمت: ۱۰۰۰۰۰ ریال

فهرست مطالب

۵	پیش گفتار نویسندگان
۷	روش های تعیین ساختار الکترونی مواد
۱۱	مروزی اجمانی بر نرم افزار <i>Wien2k</i>
۱۲	مراحل عمل کار با نرم افزار <i>Wien</i>
۱۳	(۱) طریقه ی ورود به نرم افزار وین
۱۵	(۲) ایجاد فایل ساختار (<i>Struct Generation</i>)
۱۵	(۲-۱) بخش نواد فایل وین (<i>Struct GenTM</i>)
۲۲	(۳) مرحله ی آماده سازی (<i>Initialization</i>)
۳۴	(۴) اجرای حل خود ساز در <i>SCF</i> معادله ی شرودینگر
۳۴	(۴-۱) مرحله ی <i>LAPW0</i>
۳۵	(۴-۲) مرحله ی <i>LAPW1</i>
۳۶	(۴-۳) مرحله ی <i>LAPWS0</i>
۳۶	(۴-۴) مرحله ی <i>LAPW2</i>
۳۷	(۴-۵) <i>LCORE</i>
۳۷	(۴-۶) <i>MIXER</i>
۳۷	الف) روش <i>Pratt</i>
۳۸	ب) روش <i>Broyden</i>
۳۹	۵) مراحل بهینه سازی پارامترهای مهم
۴۰	(۵-۱) بهینه سازی <i>kpoint</i>
۴۲	(۵-۲) بهینه سازی <i>Rkmax</i>
۴۴	(۵-۳) بهینه سازی <i>Gmax</i>
۴۵	(۵-۴) بهینه سازی حجم یا <i>optimize v</i>
۴۷	(۵-۴-۱) یافتن ثابت های شبکه ی تعادلی

۵۰	۲-۴-۵) مقایسه‌ی مقادیر نئوری و تجربی.....
۵۱	۵-۵) ریلکس ساختار یا مینی‌پوزیشن ساختار.....
۵۳	۶) محاسبه‌ی خواص فیزیکی.....
۵۳	۱-۶) تعیین ساختار نواری (<i>Band Structure</i>).....
۵۹	۲-۶) چگالی حالات بر واحد گسترده‌ی انرژی (<i>Density of State</i>).....
۶۳	ضمایم.....
۶۴	۱-۱) فایل ورودی ساختار لانه‌زنبری اکسید روی (<i>ZnO_2D</i>).....
۶۶	۱-۱) فایل ورودی ساختار لانه‌زنبری گرافن (<i>Graphene</i>).....
۷۰	۱-۳) فایل ورودی ساختار لانه‌زنبری گالیوم نایتراید (<i>GaN_2D</i>).....
۷۲	۱-۴) فایل ورودی ساختار ورنسایت اکسید روی (<i>ZnO_Wz</i>).....
۷۴	ضمیمه ۱: فیلم رت برنامه‌ی وین (مرجع ۵).....
۷۵	ضمیمه ۲: دریفه نصب برنامه‌ی <i>WIEN2k</i>
۷۹	منابع.....

پیش‌گفتار نویسندگان

ارتقای دانش و فناوری مواد به‌ویژه مواد جامد بلورین از مرحله‌ی سنتز پیشرفته‌ی این مواد تا ساخت قطعات نیم‌رسانای با کارایی بالا، نیازمند سیستم‌های مدرن و پرهزینه‌ی آزمایشگاهی است؛ از آنجا که در این فرآیند گسترده‌ی آزمایشگاهی، برای رسیدن به نتایج بهتر، عموماً بایستی بیشتر مراحل سنتز تا ساخت قطعه بارها و بارها در شرایط متفاوت آزمایشی در این سیستم‌های مدرن تکرار شوند، پس چنین پژوهش‌هایی علاوه بر هزینه‌های سنگین، زمان‌ی طولانی نیز هستند؛ بنابراین در این عرصه یکی از بهترین روش‌ها، رای بررسی ساختار، رفتار و خواص مواد، شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای است که از لحاظ کم هزینه بودن، کنترل‌پذیری و ... نسبت به روش‌های آزمایشگاهی برترند و به همین خاطر پژوهشگران به نتایج این شبیه‌سازی‌ها (به‌ویژه با پیشرفت‌های روزافزون در فناوری رایانه‌ها) بسیار علاقه‌مندند. این شبیه‌سازی‌ها در گستره‌ی نانوفناوری که از مهمترین عرصه‌های علم-صنعتی بشمار می‌آید نیز از اهمیت بسزایی برخوردارند و از همین رو «نانوفناوری محاسباتی» به‌عنوان یکی از مهمترین شاخه‌های دانش و فناوری نانو در پیش‌برد و اثبات نظریه‌ها و فرضیه‌های ارائه شده در این حوزه، نقش بی‌بدیل دارد. البته در اینجا این نکته‌ی مهم را نیز بایستی یادآور شویم که در این شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای حتی برای توده‌ی بسیار کوچکی از ماده از جمله برای یک نانو ساختار با انبوهی از اتم‌ها (از مرتبه‌ی عدد آووگادرو) سروکار داریم که به آنها یک سیستم بس‌ذره‌ای نیز می‌گویند.

به عنوان یک روش شناخته شده، برای تحلیل کوانتومی این انبوه‌ها و دستگاه‌های بس الکترونی نیازمند حل خودسازگار دسته معادلات کوهن-شم (KS) می‌باشیم که حجم سنگینی از محاسبات را در بردارند. البته برای این محاسبات کدهای کامپیوتری گوناگونی نوشته شده‌اند که پردازش و اجرای این کدها نیازمند کامپیوترهای با سرعت و قدرت پردازش بالا می‌باشد. پسته‌ی محاسباتی **WIEN2k** یکی از پیشرفته‌ترین این کدها می‌باشد که در ادامه‌ی این نوشتار با نگاهی گذرا به روش‌های کلی تمییز ساختار الکترونی مواد، تلاش کرده‌ایم تا مروری درخور توجه بر این پسته محاسباتی داشته باشیم.

گرچه روش‌های مجموعه‌ی مناسبی ارائه گردد با این حال پندارمان این است که در این کتاب نکات قابل اصلاحی وجود دارند که از نظر نگارندگان به دور مانده پس بهبود این نوشتار نیازمند به کار بستن ارشادات و نقطه نظران اصلاحی خوانندگان گرامی است که ما با خرسندی، مشتاق دریافت آنها هستیم. به همین منظور برای ارتباط بهتر و مؤثرتر با خوانندگان گرامی، وبلاگی همنام کتاب به آدرس <http://wien2k.blogfa.com/> طراحی شده که به نوعی می‌تواند پشتیبان کتاب نیز باشد، علاوه بر آن خوانندگان گرامی می‌توانند نظرات، پیشنهادات و سؤالات خود را از طریق ایمیل wienbook@yahoo.com مطرح کنند.

امید است استادان و صاحب نظران ما را از پیشنهادات و نظرات سازنده‌ی خود بهره‌مند سازند. همچنین علاقه‌مندان به آشنایی بیشتر و کار با نرم افزار وین می‌توانند برای تهیه‌ی این نرم افزار از طریق وبلاگ و یا ایمیل ذکر شده با نویسندگان کتاب تماس حاصل فرمایند.