

۱۵۷۴۹۹۱
۹۶-۱۲-۱۴

بسم الله الرحمن الرحيم

ابزارهای شبیه‌سازی نانوساختارها با استفاده

از نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی

گوانتوم اسپرسو

تألیف: حامد امدی

سرشناسه	: اسدی، حامد، ۱۳۷۰ -
عنوان و نام پدیدآور	: ابزارهای شبیه‌سازی نانوساختارها با استفاده از نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو / تألیف حامد اسدی.
مشخصات نشر	: تهران: گسترش علوم پایه، ۱۳۹۶.
مشخصات ظاهری	: ۱۹۲ ص: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: 978-964-490-748-7
وضعیت فهرست نویسی	: فیبا
موضوع	: نانوساختارها -- داده‌پردازی
موضوع	: Nanostructures -- Data processing
موضوع	: نانوساختارها -- الگوهای مفناطیسی
موضوع	: Nanostructures -- Mathematical models
موضوع	: توابع چگالی
موضوع	: Density functionals
موضوع	: کوانتوم -- شبیه‌سازی
موضوع	: Quantum theory -- Simulation methods
رده بندی کنگره	: ۱۳۹۶۸/۱۷۶QC الف ۵۲ن/
رده بندی دیویی	: ۵/۶۲۰
شماره کتابشناسی	: ۵۰۶۵۵۶۸

نام کتاب: ابزارهای شبیه‌سازی نانوساختارها با استفاده از نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو

مؤلف: حامد اسدی
 ناشر: انتشارات گسترش علوم پایه
 مدیر فنی: مهدی زنگنه
 صفحه آرایی: سیما ابویی
 طراحی جلد: حامد اسدی
 لیتوگرافی: مهرشاد
 چاپخانه: مهر
 سال نشر: ۱۳۹۶
 نوبت چاپ: اول
 شمارگان: ۱۰۰۰ جلد
 قیمت کتاب: ۱۱۰۰۰ ریال
 شابک ۷-۷۴۸-۴۹۰-۹۶۴-۹۷۸ 978-964-490-748-7

حق چاپ و نشر محفوظ و مخصوص ناشر می‌باشد.

دفتر انتشارات و بخش شهرستان: میدان انقلاب، ابتدای کارگر جنوبی، کوچه مهدی‌زاده، پلاک ۹، طبقه همکف

تلفن: ۱۵ ~ ۶۶۹۰۵۳۱۲ تلفکس: ۰۲۱-۶۶۹۰۵۳۱۶

دفتر سفارشات تهران: خ آزادی، خ جمال‌زاده جنوبی، خ دیلمان، پلاک ۱۴ واحد ۲

تهران: ۱۴ ~ ۶۶۵۹۵۵۱۳

نماینده‌گی تهران: خ انقلاب، نبش ۱۲ فروردین، پ ۱۴۴۴، کتابفروشی الیاس-۶۶۴۰۵۰۸۴

Email: gostaresh_op@yahoo.com

www.gostaresh-pub.com

که ضمن دقت در این مورد ما را در صورت عدم وجود هولوگرام مطلع سازید.
 (توجه) فروشنده و خواننده گرامی: این کتاب دارای برچسب اصالت کالا (هولوگرام) در روی جلد است با تشکر

پیشگفتار

کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو، از جمله کدهای محاسباتی توسعه باز است که به صورت پیوسته در حال توسعه و بهبود است. در این کتاب سعی بر این داشتیم تا از نقطه‌ی صفر علوم محاسباتی یعنی کار با سیستم عامل مورد نظر شروع کرده و تا نقطه‌ی پایانی محاسبات، مسیر را توضیح دهیم. در فصل اول، توضیحات خلاصه و مفیدی برای کار با سیستم عامل لینوکس ارائه شد است که کاربر می‌تواند بدون زمینه قبلی، از آن استفاده نماید. در فصل دوم کتاب، تئوری تابعی چگالی توضیح داده شده است و خواننده می‌تواند نظریه مورد استفاده در کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو را مطالعه نماید و با روش‌های آن آشنا شود. توصیه می‌شود حتماً این فصل با دقت خوانده شود. در فصل سوم کتاب، کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو و نحوه نصب آن توضیح داده شده است که خواننده می‌تواند با بخش‌های مختلف و پتانسیل‌های این کد، آشنا شود. در فصل چهارم کتاب، مامی متغیرهای مورد استفاده در ساخت فایل ورودی، ارائه و توضیح داده شده است و خواننده می‌تواند با توجه به هدفی که دارد، از این متغیرها استفاده نماید. فصل پنجم این کتاب مربوط به رابط گرافیکی کوانتوم اسپرسو است و کسانی که استفاده از رابط گرافیکی برای آن‌ها مورد توجه بیشتری نسبت به روش کد نویسی است، می‌توانند با خواندن این فصل، نحوه استفاده از آن را فرا گیرند. در فصل ششم تلاش شده تا فرمولبندی و نظریه جذب سطحی و شیمیایی بیان شود تا کسانی که قصد ایجاد محاسبات جذب را دارند، به راحتی با خواندن این فصل، اطلاعات مورد نیازشان را به دست آورند. در نهایت فصل هفتم مسیری را برای خواننده ایجاد کرده است تا بتواند با روش انجام محاسبات آشنا شده و اقدام به انجام آن نماید. کافی است تا فایل‌های ورودی توضیح داده شده در این فصل را به صورت آنچه که نیاز دارید تغییر دهید و از آن‌ها استفاده نمایید.

حامد اسدی

پاییز ۱۳۹۶

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه‌ای بر سیستم عامل و لینوکس ۱۱

- ۱-۱- مقدمه ۱۱
- ۲-۱- پوسته دستورات چیست؟ ۱۲
- ۳-۱- BASH چیست؟ ۱۳
- ۴-۱- BASH چه تفاوتی با خط فرمان DOS دارد؟ ۱۳
- ۵-۱- باراک‌های ویژه و پرکاربرد ۱۳
- ۶-۱- درخواست راهنمای دستورات ۱۶
- ۷-۱- کتابچه راهنما آنلاین "man pages" ۱۶
- ۸-۱- ۱۷
- ۹-۱- هدایت کردن filesytem لینوکس ۱۷
- ۱۰-۱- برخی دستورات برای آرکس ۱۹

فصل ۲: نظریه تابعی چگالی ۲۳

- ۱-۲- مقدمه ۲۳
- ۲-۲- سیستم‌های بس ذره‌ای ۲۴
- ۳-۲- تقریب الکترون مستقل ۲۶
- ۴-۲- قضایای هوهنبرگ - کوهن ۲۸
- ۵-۲- تقریب کوهن - شم ۳۰
- ۶-۲- روش حل خودسازگار معادلات کان - شم ۳۵
- ۷-۲- شبه پتانسیل ۳۶

فصل ۳: کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو و چگونگی نصب آن ۳۹

- ۱-۳- مقدمه ۳۹
- ۲-۳- نصب کوانتوم اسپرسو ۴۲
- ۱-۲-۳- مراحل نصب ۴۳

فصل ۴: نحوه ایجاد فایل ورودی در کوانتوم اسپرسو ۴۷

۴۷	۱-۴ مقدمه
۴۹	۲-۴ سربرگ &CONTROL
۵۸	۳-۴ سربرگ &SYSTEM
۷۱	۲۶ - nspin
۸۸	۴-۴ سربرگ &ELECTRONS
۹۵	۵-۴ سربرگ &IONS
۱۰۲	۶-۴ سربرگ &CELL
۱۰۵	۷-۴ سربرگ ATOMIC_SPECIES
۱۰۶	۸-۴ سربرگ ATOMIC_POSITIONS
۱۰۹	۹-۴ سربرگ K_POINTS
۱۱۲	۱۰-۴ سربرگ CELL_PARAMETERS
۱۱۳	۱۱-۴ سربرگ CONSTRAINTS

فصل ۵: رابط گرافیکی PWgui ۱۱۵

۱۱۵	۱-۵ مقدمه
۱۱۵	۲-۵ نصب PWgui
۱۱۶	۳-۵ راهنمایی‌های موجود در رابط گرافیکی
۱۱۶	۴-۵ شروع کار با رابط گرافیکی PWgui
۱۱۸	به‌عنوان مثال:

فصل ۶: ناخالصی‌ها و جذب ۱۲۷

۱۲۷	۱-۶ مقدمه
۱۲۷	۲-۶ جذب سطحی
۱۲۹	۱-۲-۶ جذب فیزیکی و شیمیایی
۱۳۴	۲-۲-۶ تفاوت جذب فیزیکی و شیمیایی
۱۳۵	۳-۶ مدلسازی پتانسیل لنارد - جونز
۱۳۷	۴-۶ بررسی جذب توسط کدهای محاسباتی

فصل ۷: خواص ساختاری و نحوه استخراج آن توسط کد کوانتوم اسپرسو... ۱۳۹

۱-۷	مقدمه	۱۳۹
۲-۷	گرافن	۱۳۹
۱-۲-۷	ساختار گرافن	۱۳۹
۲-۲-۷	مفاهیم پایه برای ساختن فایل ورودی محاسبات	۱۴۲
۱-۲-۲-۷	انرژی قطع EcutOff	۱۴۲
۲-۲-۲-۷	مش بندی k-pont	۱۴۵
۳-۲-۲-۷	ساختار نواری	۱۴۶
۴-۱-۲-۷	چگالی حالات الکترونیکی	۱۵۳
۳-۱-۲-۷	انجام محاسبات ساختار	۱۵۸
۳-۲-۷	بازسازی ساختار	۱۵۸
۲-۱-۲-۷	استخراج ساختار نواری	۱۶۸
۳-۳-۲-۷	استخراج چگالی حالات الکترونی	۱۷۵
۴-۳-۲-۷	استخراج حالت حالات جزئی	۱۷۷
۵-۳-۲-۷	توپولوژی با	۱۸۰
۳-۷	جذب و شناسایی اتم یا مولکول	۱۸۳
۱۸۷	واژه نامه انگلیسی به فارسی:	
۱۸۸	Abstract	
۱۸۹	منابع	