





دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

به عنوان بخشی از ملزومات برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته  
فیزیک ماده چگال

عنوان

# تولید برنامه اتصال بسته‌های محاسباتی FPLO و WANNIER90 برای محاسبه توابع وانیر بیشینه جایگزیده در زنجیره‌ی کربن و سیلیسین

نگارش

مرصاد مستقیمی

استاد راهنما

دکتر سید جواد هاشمی فر

استاد مشاور

دکتر مجتبی اعلایی

دی ۱۳۹۴



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد کارشناسی ارشد

**تولید برنامه اتصال بسته‌های محاسباتی FPLO و WANNIER90 برای محاسبه توابع  
وأنیر بیشینه جایگزیده در زنجیره‌ی کربن و سیلیسین**

نگارش: مرصاد مستقیمی

در تاریخ ۱۳۹۴/۱۰/۲۷ توسط کمیته‌ی تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

امضاء: استاد راهنما: آقای دکتر سید جواد هاشمی فر

امضاء: استاد مشاور: آقای دکتر مجتبی اعلایی

امضاء: استاد ممتحن مدعو: خانم دکتر نفیسه رضایی

امضاء: استاد ممتحن داخلی: آقای دکتر اسماعیل عبدالحسینی سارسری

امضاء: سرپرست تحصیلات تکمیلی: آقای دکتر فرهاد شهبازی

# اظهار نامه

اینجانب مرصاد مستقیمی اظهار می‌دارم که اصالت تحقیقات انجام شده در این پایان‌نامه، به جز مواردی که به مرجع ذکر شده ارجاع داده شده است، منحصراً متعلق به اینجانب بوده و قبلاً در هیچ جا به صورت کلی یا جزئی منتشر نشده است. همچنین کلیه حقوق مادی و معنوی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان می‌باشد.

مرصاد مستقیمی

امضاء

# نوآوری‌ها

- محاسبه توابع بیشینه جایگزیده وانیر با استفاده از کد FPLO
- نوشتن برنامه تولیدکننده ورودی های کد WANNIER90
- بررسی ساختارهای زنجیره کربن و سیلیسین و بررسی عملکرد کدهای فوق در این ساختارها

# سپاس‌گزاری

در مرام آزادگی بوسه بر پیچ دستی مجاز نیست جز دست معلم.  
پس من بوسه می‌زنم بر دستان  
مادری که در جای خالی پدر ایستاد و به من زندگی آموخت  
خواهری که پشت من ایستاد و به من تلاش آموخت  
و استادانی که در کنار من ایستادند و اندیشیدن را به من آموختند.

خانواده در زندگی هر کسی نقش بسیار مهمی دارد. خانواده مهمترین چیزی است که هر کسی می‌تواند داشته باشد. مادر من یک شیر زن است و خواهرم نور زندگی برادر. عموی بزرگوارم کسی است که چگونه اندیشیدن را به من آموخته است و مرحوم پدر بزرگم کسی است که انسانیت را به من یاد داد. اما من یک خانواده در دانشگاه داشتم که در این دو سال و نیم کارشناسی ارشد به آنها تکیه داده بودم. به قول مرحوم شکیبایی یک استاد باید سبز باشد. آری! سبز دقیقاً مثل دکتر هاشمی‌فر که برای من پدری معنوی است همان‌طور که پرفسور اکبرزاده برای او. دکتر اعلایی دوست داشتنی که بارانی بود از آنچه که می‌خواهی یاد بگیری و درست گفته است آن شاعر که «زیر باران باید رفت». باران و نسیم با هم هستند و طراوت را در این راه که گاهی مرا خسته می‌نمود مدیون نسیم روح‌بخش وجود خانم دکتر رضایی هستم. رفاقت واژه‌ی عمیقی است. رفیق آینه‌ایست که به تو آنچه هستی را می‌نماید. الحق که دکتر عبدالحسینی نه تنها یک استاد که یک رفیق بی‌نظیر است. دوستان خوبی در گروه محاسباتی، تجربی، نظری و بچه‌های هسته‌ای و ذرات داشتم که از همه آنها ممنونم. همچنین باید از خانم کوچکی و مهندس صدری تشکر کنم به خاطر اعتمادی که به من داشتند. در آخر باز می‌گویم که دست‌بوس همه‌ی آنها می‌هستم که حتی کلمه‌ای به من آموخته‌اند. لازم به ذکر است فایل این پایان‌نامه و برنامه‌های آن از <https://github.com/mersadkhan> قابل دریافت می‌باشد.

مرصاد مستقیمی

دی ۱۳۹۴

# فهرست مطالب

شش	سپاس‌گزاری
نه	فهرست تصاویر
ده	چکیده
۱	فصل ۱ اهمیت نمایش جایگزیده وانیر
۱	۱.۱ نمایش‌های دوره‌ای و ویژگی‌های آنها
۴	۲.۱ نمایش وانیر و ویژگی‌های آن
۹	فصل ۲ رهیافت توابع وانیر بیشینه جایگزیده
۹	۱.۲ رهیافت پتانسیل کامل با اوربیتال‌های جایگزیده
۱۴	۱.۱.۲ بهینه‌سازی پایه‌ها
۱۵	۲.۱.۲ محاسبات نسبی در FPLO
۱۷	فصل ۳ یک راهنما
۱۷	۱.۳ نمونه لغات
۲۲	پیوست الف مدیریت مراجع در تک
۲۳	پیوست ب اتصال بسته محاسباتی Wannier90 و FPLO
۲۳	ب.۱ چگالی حالات هیبریدی و هیبریدی منطقه ای
۲۵	پیوست پ معرفی ورودی‌ها و خروجی‌ها
۳۰	واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

۳۲

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

۳۴

فهرست اختصارات

۳۶

مراجع



# فهرست تصاویر

۱۰۱	الف : توابع بلوخ متناظر با سه نقطه $k$ مختلف در یک بعد در فضای واقعی که قسمت سبز رنگ، مربوط به پوش $e^{ikr}$ است. ب : توابع وانیر جایگزیده که فضای متناظر با سمت چپ را تنیده است [۱] . . . . .	۲
۲۰۱	الف : نوارهای انرژی و ب : چگالی الکترونی در بلور Si [۲] . . . . .	۳
۳۰۱	نمایش سطح کاهش یافته برای بلور سیلیسیم [۳] . . . . .	۴
۴۰۱	مقایسه توابع وانیر بلور Si با تصویر تجربی ابر الکترونی این سیستم. . . . .	۴
۵۰۱	مقایسه‌ی مقیاس زمانی محاسبات ساختار الکترونی در خوشه‌ی سیلیسیم و فولرن با استفاده از رهیافت‌های مختلف [۴] . . . . .	۶
۱۰۲	روندنمای محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده . . . . .	۱۰
۱۰۳	این مثالی از یک کنش <sup>۱</sup> مجاز است. . . . .	۱۹
۲۰۳	این مثالی از یک کنش مجاز است. . . . .	۲۰
۳۰۳	پیر سیمون لاپلاس . . . . .	۲۱

---

<sup>۱</sup>Action

## چکیده

در این پایان نامه به محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده‌ی زنجیره‌ی کربن و سیلیسین با استفاده از نرم‌افزارهای FPLO و WANNIER90 پرداخته شد. ابتدا الگوریتم مارزاری<sup>۱</sup> و واندربیلت<sup>۲</sup> برای محاسبه‌ی توابع بیشینه جایگزیده و بسته محاسباتی WANNIER90 که بر مبنای این الگوریتم توسعه داده شده است، معرفی گردید. همچنین به شناخت بسته محاسباتی FPLO که بر مبنای نظریه تابعی چگالی است و شناخت پایه‌های آن پرداخته شده است. سپس با استفاده از بسته محاسباتی FPLO خواص الکترونی زنجیره کربن و سیلیسین محاسبه شد. در ادامه با استفاده از زبان برنامه‌نویسی پایتون و نتایج حاصل از خروجی بسته محاسباتی FPLO، برنامه‌ای برای ساخت ماتریس همپوشانی و ماتریس حدس اولیه، جهت ورودی بسته محاسباتی WANNIER90 نوشته شد. در انتها با استفاده از ماتریس‌های تولید شده و بسته محاسباتی WANNIER90 توابع وانیر بیشینه جایگزیده زنجیره کربن و سیلیسین را محاسبه و بررسی گردید. در طی این فرآیند چگالی حالات هیبریدی نیز محاسبه شد.

واژه‌های کلیدی: بلوخ، FPLO، وانیر، پایتون، پتانسیل کامل، اربیتال‌های جایگزیده، چگالی حالات، ماده چگال محاسباتی

---

<sup>۱</sup>Marzari

<sup>۲</sup>Vanderbilt

## فصل ۱

# اهمیت نمایش جایگزیده وانیر

### ۱.۱ نمایش‌های دوره‌ای و ویژگی‌های آنها

بلورها و خواص آنها از دیرباز مورد علاقه دانشمندان فعال در عرصه شناخت مواد بوده است. پس از کشف روش طیف نگاری اشعه x در اوایل قرن بیستم ماهیت دوره‌ای بلورها و تقارن‌های نقطه‌ای و انتقالی موجود در این سیستم‌ها با دقت بالایی آشکار گردید. در رهیافت‌های تک الکترونی در نظریه‌ی کوانتوم رفتار الکترون با معادله شرودینگر تک ذره‌ای زیر توصیف می‌شود:

$$H\psi_i = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

که پتانسیل بلوری  $V(\mathbf{r})$  از شرط تناوبی

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

تبعیت می‌کند. دوره تناوب این پتانسیل، بردار انتقال شبکه  $\mathbf{R}$  است؛ لذا عملگر  $H$  نسبت به همه‌ی انتقال‌های شبکه ناورداست. ناوردایی هامیلتونی  $H$  تحت هر انتقال  $T$  موجب می‌شود که عملگر هامیلتونی با همه‌ی عملگرهای انتقال  $T$  جابجا شود [۵].

$$[H, T_{\mathbf{R}}] = 0 \quad (3.1)$$

جابجایی بالا به ما امکان می‌دهد تا از توابع بلوخ به عنوان جواب معادله‌ی شرودینگر فوق استفاده کنیم. این توابع توسط فیلیکس بلوخ<sup>۱</sup> سوئسی برای توصیف رفتار الکترونی مواد در ساختارهای تناوبی معرفی شده‌اند. قضیه بلوخ

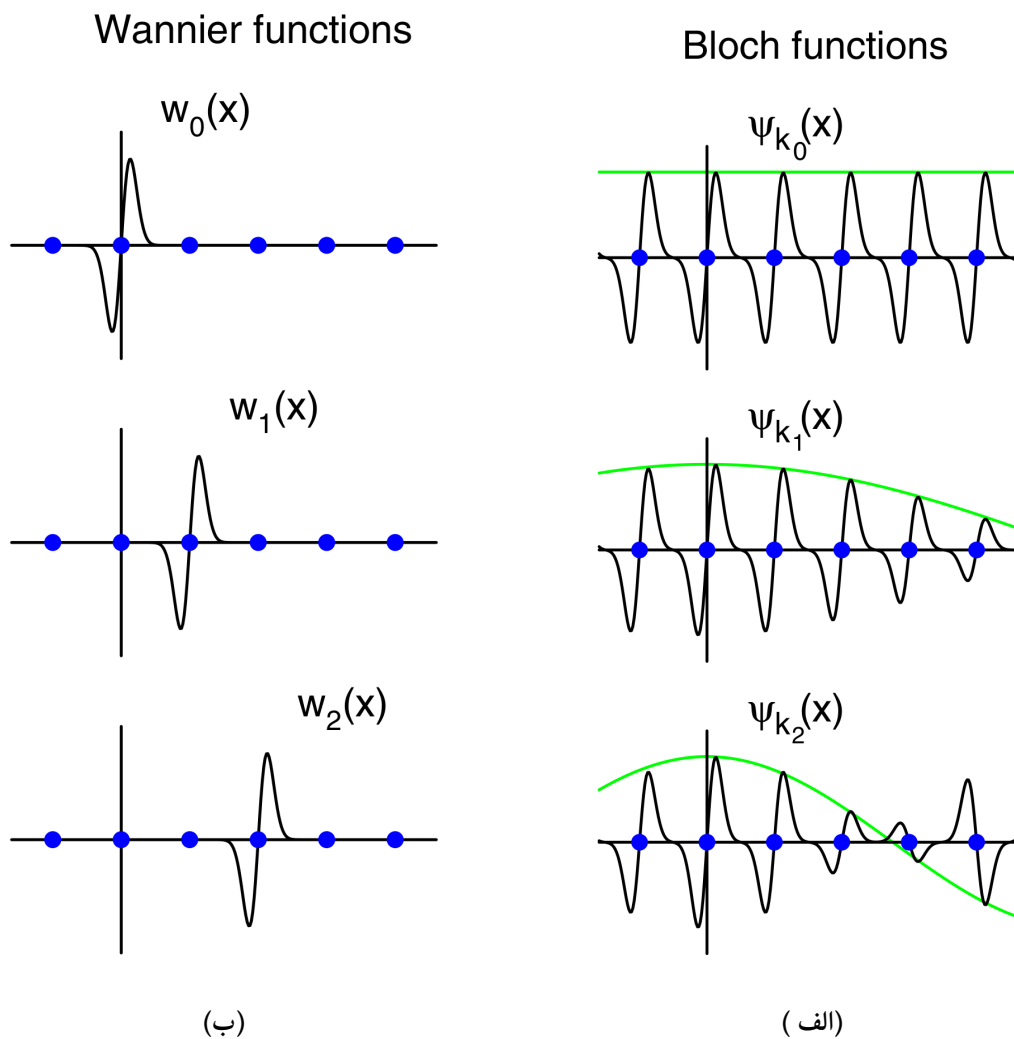
<sup>۱</sup>Felix Bloch

نشان می‌دهد که جواب معادله شرودینگر در یک سیستم بلوری به صورت زیر است:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (۴.۱)$$

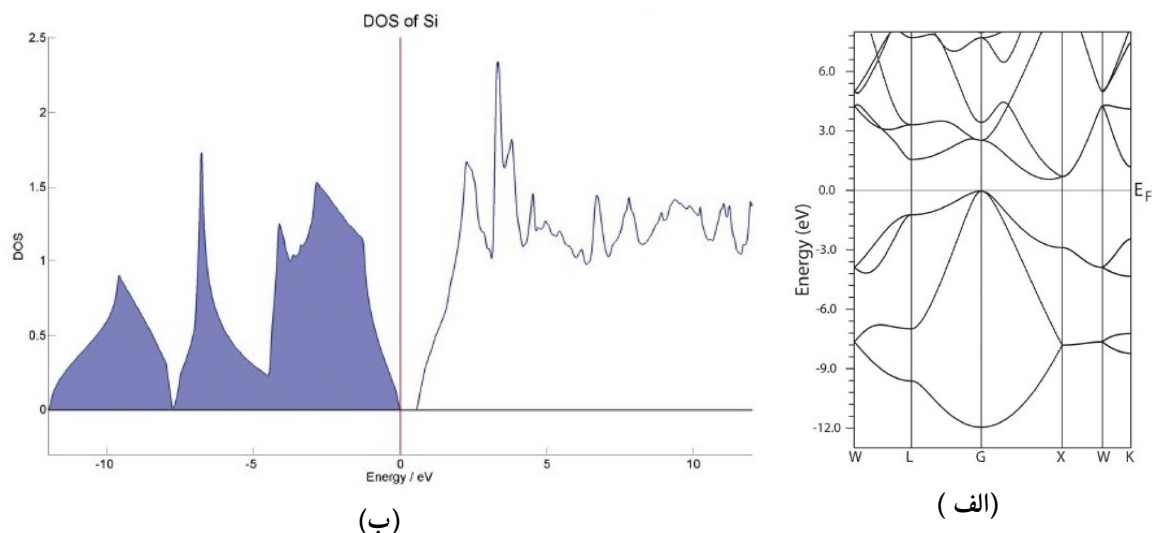
$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (۵.۱)$$

که در آن  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  بخش دوره‌ای تابع موج با همان دوره تناوب شبکه بلوری،  $n$  عدد کوانتومی اصلی و  $\mathbf{k}$  بردار موج می‌باشند. بردار موج طبق شرایط مرزی بورن-فون-کارمن در منطقه اول بریلوئن تعریف می‌شود [۶]. قسمت  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  توصیفگر پوش بخش دوره‌ای است. به عبارت دیگر اگر یک تابع موج تخت را با یک تابع دوره‌ای در هم ضرب کنیم به یک تابع موج بلوخ خواهیم رسید. شکل ۱.۱ الف به صورت شماتیک نمایشی از توابع بلوخ را نشان می‌دهد.



شکل ۱.۱ - الف : توابع بلوخ متناظر با سه نقطه  $k$  مختلف در یک بعد در فضای واقعی که قسمت سبز رنگ، مربوط به پوش  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  است. ب : توابع وانیر جایگزیده که فضای متناظر با سمت چپ را تنیده است [۱]

توابع بلوخ جایگزیده نبوده و در سرتاسر بلور گسترده شده‌اند و می‌توانند در بسته‌های موج جمع شوند. این توابع برای محاسبه در فضای وارون مناسب‌اند. از این رو توصیف خوب نوارهای<sup>۱</sup> انرژی، چگالی حالات (DOS<sup>۲</sup>)، محاسبات فونونی و انرژی فرمی از مزایای مهم و پرکاربرد نمایش‌های دوره‌ای است - شکل ۲.۱ - که موجب شده است تا در بسیاری از بسته‌های شبیه‌سازی محاسباتی مواد از این نمایش استفاده شود. [۷] گستردگی توابع بلوخ باعث



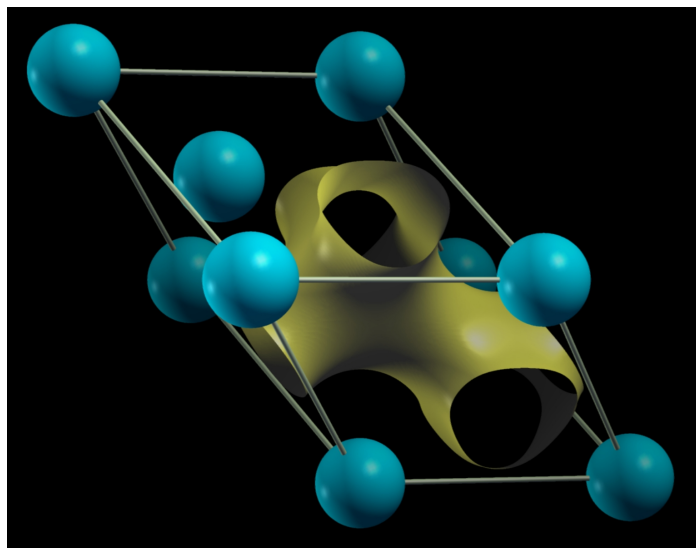
شکل ۲.۱ - الف : نوارهای انرژی و ب : چگالی الکترونی در بلور Si [۲]

می‌شود تا این توابع گزینه مناسبی برای محاسبات مربوط به خواص وابسته به رفتار موضعی الکترون نباشند. از این رو نمی‌توان از این توابع برای بررسی خواصی مانند ترابرد کوانتومی که وابسته به محاسبه‌ی تابع گرین هستند، استفاده کرد.

همان‌طور که ذکر شد، توابع بلوخ نمایشگر اوربیتال‌های گسترده بلوری هستند؛ بنابراین هیچ‌گونه توصیف شهودی از اوربیتال‌های الکترونی پیوندی ارائه نمی‌دهد. نمایش به دست آمده از این توابع به صورت یک نمایش سطح کاهش یافته<sup>۳</sup> ارائه می‌شود. (شکل ۳.۱)

<sup>۱</sup>Band  
<sup>۲</sup>Density Of States

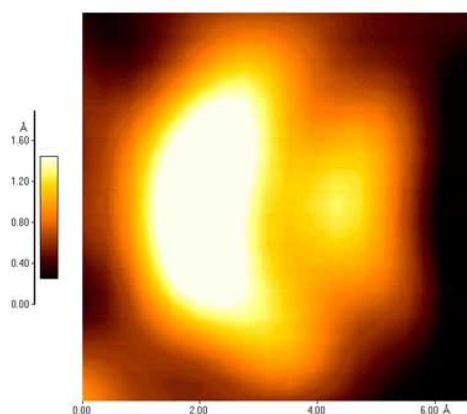
<sup>۳</sup>Isosurface



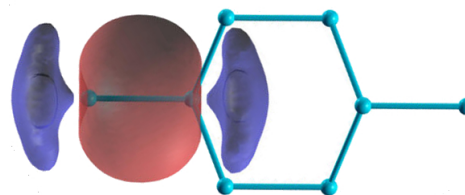
شکل ۳.۱ - نمایش سطح کاهش یافته برای بلور سیلیسیم [۳]

## ۲.۱ نمایش وانیر و ویژگی‌های آن

یک نمایش دیگر برای بررسی رفتارهای الکترونی در بلورها نمایش وانیر است. این نمایش که تبدیل فوریه‌ی نمایش بلوخ است، ابزاری مناسب برای توصیف در فضای حقیقی می‌باشند. به عبارت دیگر توابع وانیر تصویری شهودی از وضعیت ابر الکترونی و به عبارتی پیوندهای شیمیایی ارائه می‌کنند. همان‌طور که در شکل ۴.۱ دیده می‌شود توابع وانیر محاسبه شده برای سیلیکون تناظر بالایی با تصویر گرفته شده توسط میکروسکوپ<sup>۱</sup> AFM از ابر الکترونی در این سیستم دارند [۸].



(ب) - تصویر گرفته شده از تک اتم Si با میکروسکوپ AFM [۱۰]



(الف) - تصویر حاصل از محاسبه توابع وانیر پیشینه جایگزیده [۹]

شکل ۴.۱ - مقایسه توابع وانیر بلور Si با تصویر تجربی ابر الکترونی این سیستم.

توابع وانیر انتخاب جذابی برای نمایش فضای تنیده شده با نوار بلوخ در بلور مقابل ما قرار می‌دهند که توأم با جایگزیدگی همه اطلاعات توابع بلوخ را در خود دارد. توابع وانیر از نمایش‌های جایگزیده مهم و پرکاربرد در محاسبات

<sup>۱</sup>Atomic Force Microscopy

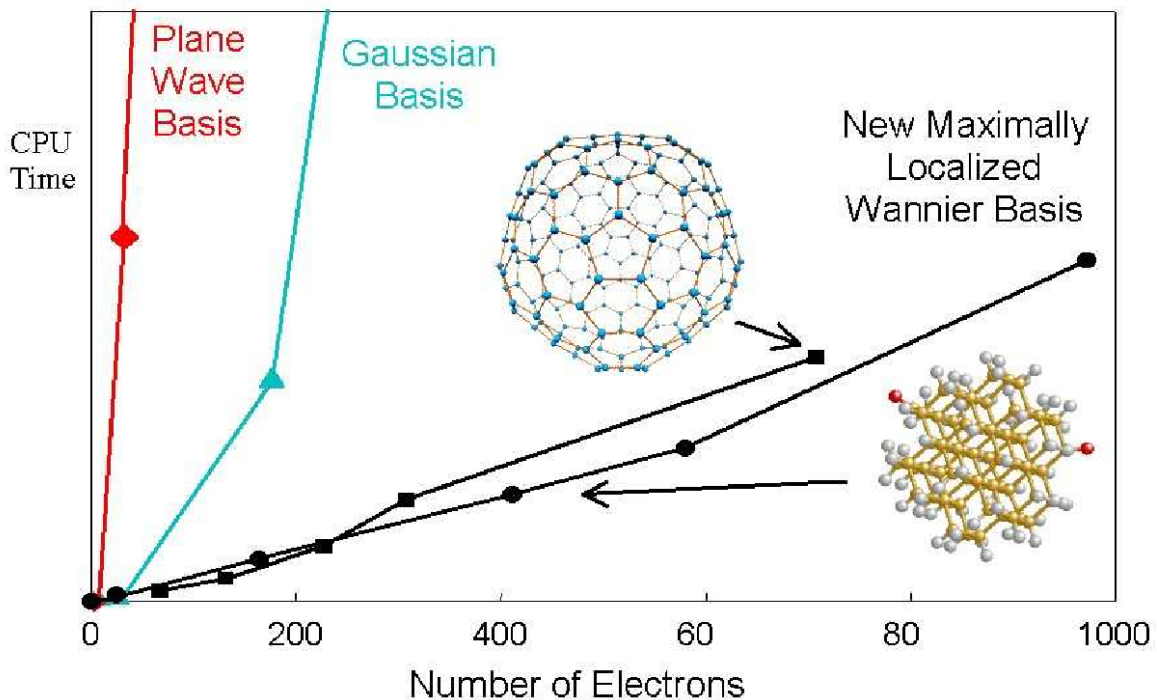
ساختار الکترونی مواد به شمار می‌آیند. این توابع در سال ۱۹۳۷ توسط گرگوری وانیر<sup>۱</sup> معرفی شدند. [۱۱] استفاده از این توابع و خواص منحصربه‌فرد آن‌ها باعث شده است درک بهتری از رفتار موضعی الکترون در ماده و خواص نانو مقیاس آن به دست آید. به همین دلیل در بسیاری از نرم‌افزارهای محاسبات ساختار الکترونی ابزارهای ویژه‌ای برای به دست آوردن این توابع و خواص حاصل از آن‌ها توسعه داده شده است. جایگزیدگی توابع وانیر مزایای بسیاری به خصوص در مواردی که هدف بررسی رفتارهای موضعی الکترون‌هاست، ایجاد می‌کند. در واقع این توابع معادل اوربیتال‌های مولکولی جایگزیده<sup>۲</sup> هستند و تصویری از طبیعت شیمیایی پیوندها در مواد ارائه می‌کنند [۱۲]. برای این منظور حالات الکترونی اشغالی را بر حسب توابع وانیر بیشینه جایگزیده<sup>۳</sup> بسط داده و اطلاعاتی مربوط به ویژگی‌های پیوند و مختصات شیمیایی مواد را به دست می‌آورند. رفتار موضعی الکترون در برخی پدیده‌های فیزیکی مانند ترابرد کوانتومی، ناخالصی در جامدات، اتم‌های سرد و... به استفاده از نمایش جایگزیده‌ی تابع موج در فیزیک کوانتوم رونق بخشیده است. این‌گونه رفتارها در بررسی پدیده‌های الکترونیکی، اپتیک و لیزر، نانومواد و... نیز مهم هستند. در ادامه این بخش به پاره‌ای از پژوهش‌هایی که در حوزه ساختار الکترونی مواد با استفاده از توابع وانیر انجام می‌شود، به اختصار خواهیم پرداخت. برای آشنایی بیشتر با کاربردهای این توابع و به خصوص توابع وانیر بیشینه جایگزیده (MLWFs) می‌توان به مقاله‌ای که نیکولا مارزازی و دیگران در سال ۲۰۱۲ انتشار داده‌اند، مراجعه نمود [۱].

یکی از مزایای کاربردی توابع وانیر توصیف ویژگی‌های دی‌الکتریک و الکترونی مواد است. این کار از طریق بررسی تغییرات در شکل و یا تقارن توابع وانیر بیشینه جایگزیده و یا تغییر در جایگاه مراکز بار به دست می‌آید. مرکز توزیع توابع وانیر بیشینه جایگزیده تناظر کلاسیکی برای مکان یک الکترون در عایق کوانتومی فراهم می‌کند که در آن مراکز توابع وانیر بیشینه جایگزیده به قطبش ماکروسکوپی یک عایق بلورین مرتبط می‌شوند و در نظریه‌ی مدرن فاز بری قطبش انبوه بیشتر گسترش یافته است [۱۳].

از دیگر مزایای استفاده از توابع وانیر بیشینه جایگزیده در محاسبات ساختار الکترونی کاهش حجم محاسبات ناشی از قیود غیرموضعی است. نمونه‌ای از این مورد در رهیافت‌های استاندارد تابعی چگالی است که نیازمند توابع راست‌هنجاراند<sup>۴</sup>. این قیود باعث افزایش حجم محاسبات می‌گردد؛ به طوری که در حالت متعارف با دو برابر شدن تعداد ذرات سیستم مورد مطالعه، حجم محاسبات هشت برابر می‌شود. این مسأله در توابع وانیر به دلیل جایگزیدگی توابع تنها به تعداد کمی همپوشانی با همسایگان نزدیک محدود شده که به طور کلی مستقل از ابعاد سیستم می‌باشد [۱۴]. از توابع جایگزیده در گسترش صحیح رهیافت‌های مقیاس خطی<sup>۵</sup> استفاده شده است. [۱۵] توابع وانیر بیشینه جایگزیده در صورت استفاده به عنوان توابع پایه بسط - شکل ۵.۱- هزینه محاسبات را به شدت کاهش می‌دهند؛ به گونه‌ای که زمان محاسبات با اندازه سیستم تقریباً رابطه خطی خواهد داشت [۱۶].

این نمایش جایگزیده در توسعه هامیلتونی‌های مدل - هابارد، تنگابست و... نیز به کار رفته است که موجب بررسی سیستم‌های فرمیونی هم‌بسته‌ی قوی شده است [۱۷]. همچنین از آنها برای ساخت توابع گرین در فرمالیسم لانداور<sup>۶</sup> به منظور مطالعه رسانندگی بالستیک<sup>۷</sup> [۱۸]، گرمایی [۱۹] و الکتریکی [۲۰] مواد به خصوص در مواردی که

<sup>۱</sup>Gregory Wannier<sup>۲</sup>Localized Molecular Orbitals<sup>۳</sup>Maximum Localized Wannier Functions<sup>۴</sup>Orthonormal<sup>۵</sup>Linear-scaling<sup>۶</sup>Landauer<sup>۷</sup>Ballistic



شکل ۵.۱ - مقایسه‌ی مقیاس زمانی محاسبات ساختار الکترونی در خوشه‌ی سیلیسیم و فولرن با استفاده از رهیافت‌های مختلف [۴]

سرشت کوانتومی مدنظر است، استفاده می‌شود [۲۱]. ترابرد کوانتومی<sup>۱</sup> زمینه‌ای است که توابع وانیر بیشینه جایگزیده در آن بسیار موفق عمل کرده است. در این شاخه به دلیل آنکه رفتار موضعی الکترون مدنظر است، این توابع با تولید ماتریس‌های هامیلتونی که بیشتر عناصر دور از قطرشان صفر است و تقریباً سه قطری هستند، امکان دستیابی به تابع گرین را راحت‌تر می‌نماید؛ از این رو در محاسبات مربوط به ترابرد کوانتومی بسیار سودمنداند [۲۲]. در بخش ۱.۱ گفته شد که توابع بلوخ در کل فضا گسترده اند، بنابراین بسط فوریه آنها یعنی توابع وانیر جایگزیده است:

$$\begin{aligned}
 w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = |\mathbf{R}n\rangle &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) |\psi\rangle \\
 &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}
 \end{aligned} \quad (6.1)$$

که در آن  $\mathbf{R}$  بردار شبکه در فضای واقعی است. تابع وانیر  $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  در یاخته  $\mathbf{R}$  در نقطه‌ای در مکان

$$\bar{r}_{r\mathbf{R}} = \langle \mathbf{R}n | r | \mathbf{R}n \rangle \quad (7.1)$$

جایگزیده شده است. (شکل ۱.۱ ب)

توابع وانیر راست‌هنجار بوده و مجموعه کاملی را تشکیل می‌دهند، اما ویژه توابع معادله شرودینگر نمی‌باشند.

<sup>۱</sup>Quantum Transport



مجموعه توابع بلوخ در بردارهای  $k$  مختلف در فضای وارون و مجموعه‌ی توابع وانیر در بردارهای شبکه مختلف  $R$  در فضای مستقیم، فضای هیلبرت یکسانی را می‌تند. برای نمونه در شکل ۱۰.۱ ب تعدادی از توابع بلوخ در یک سیستم دوره‌ای یک بعدی و توابع وانیری که فضای هیلبرت یکسانی با آن را می‌تند آورده شده است. این شکل برای یک مدل فرضی است و نوار مورد علاقه ما ترکیبی از اوربیتال‌های  $p$ -شکل می‌باشد که مرکز آن روی هر اتم قرار دارد. این‌گونه فرض شده که این نوار از نوارهای بالایی و پایینی در تمامی  $k$ ها منزوی شده است. از آنجایی که هر تابع بلوخی در  $k$ های مختلف دارای تابع پوش متفاوتی است، می‌توان انتظار داشت که با برهم‌نهی توابع بلوخ در  $k$ های مختلف بسته موج جایگزیده‌ای تولید شود. برای بدست آوردن بسته موج جایگزیده در فضای حقیقی، به دامنه‌ی گسترده‌ای از برهم‌نهی‌ها در فضای  $k$  نیاز است. بنابراین در یک حالت خاص می‌توان نوشت:

$$w_0(\mathbf{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (8.1)$$

که در آن  $V$  حجم یاخته بنیادی در فضای حقیقی است و انتگرال روی تمام منطقه بریلوئن انجام می‌شود. معادله ۸.۱ را می‌توان به عنوان تابع وانیر قرار گرفته در یاخته مرکزی در نظر گرفت که نمایش آن در بالاترین تصویر سمت راست شکل ۱۰.۱ آمده است. حال می‌توان یک فاکتور فاز  $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  با اثر جابجایی تابع وانیر در فضای حقیقی را در انتگرال‌گیری معادله‌ی ۸.۱ وارد کرد که در شکل ۱۰.۱ با  $w_1$  و  $w_2$  ترسیم شده است. در نمایش دیراک<sup>۱</sup> منظور از  $|\mathbf{R}n\rangle$ ، تابع وانیر  $w_{n\mathbf{R}}$  در سلول  $\mathbf{R}$  مربوط به نوار  $n$  است و به شکل زیر نوشته می‌شود [۲۳].

$$|\mathbf{R}n\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad (9.1)$$

به این ترتیب توابع وانیر  $|\mathbf{R}n\rangle$  و  $|\mathbf{R}'n\rangle$  تحت انتقال بردار شبکه  $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$  به هم مربوط می‌شوند. وارون معادله‌ی ۹.۱ با توجه به بسط فوریه به شکل زیر در می‌آید:

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) |\mathbf{R}n\rangle \quad (10.1)$$

در صورتی که فاز مناسب  $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  استفاده شود، هر یک از توابع بلوخ در سمت چپ شکل ۱۰.۱ با برهم‌نهی توابع وانیر نشان داده شده در سمت راست ساخته می‌شود.

بسط‌های معادلات ۹.۱ و ۱۰.۱ پایه‌ریز یک تبدیل یکانی بین حالات وانیر و بلوخ است. بر همین اساس علی‌رغم اینکه توابع وانیر ویژه حالت هامیلتونی نیستند، هر دو مجموعه حالات، توصیف صحیح و یکسانی از زیرفضای نواری ارائه می‌دهند. برای مثال چگالی بار ناشی از جمع روی مربعات توابع بلوخ  $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$  و توابع وانیر  $|\mathbf{R}n\rangle$  یکتاست؛ همین استدلال برای بررسی هر عملگر تک-ذره‌ای دیگری قابل اعمال است. هم‌ارزی نمایش‌های وانیر و بلوخ با

<sup>۱</sup>Dirac

معرفی عملگر تصویر  $P$  بارزتر می‌شود.

$$P = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d\mathbf{k} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{n\mathbf{k}}| = \sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}n\rangle \langle \mathbf{R}n| \quad (11.1)$$

یکی از مهمترین ویژگی‌های توابع وانیر وجود یک آزادی پیمانه‌ایست که در توابع بلوخ وجود دارد و توسط معادله شرودینگر تعیین نمی‌شود. این آزادی پیمانه‌ای در توابع بلوخ، موجب نایکتایی توابع وانیر می‌شود. مارزاری و واندریلت با استفاده از این آزادی پیمانه‌ای، روشی برای به دست آوردن توابع وانیر بیشینه جایگزیده معرفی کردند که در فصل بعد به شکلی مبسوط این رهیافت و فرمولبندی آن را بررسی خواهیم نمود.

## فصل ۲

# رھیافت توابع وانیر بیشینه جایگزیده

### ۱.۲ رھیافت پتانسیل کامل با اوربیتال‌های جایگزیده

در ادامه این فصل به بررسی اجمالی در مورد رھیافت محاسباتی نرم‌افزار FPLO<sup>۱</sup> که در چارچوب نظریه تابعی چگالی<sup>۲</sup> و بر مبنای روش پتانسیل کامل و استفاده از اوربیتال‌های جایگزیده تولید شده است، می‌پردازیم [۲۴، ۲۵]. این روش بر مبنای بهینه‌سازی روش ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی<sup>۳</sup> به وسیلهی بهبود جایگزیدگی اوربیتال‌های اتمی توسط یک پتانسیل جاذبه است [۲۶]. در فصول آینده خواهیم دید که هدف از این پایان‌نامه ایجاد یک رابط بین این بسته‌ی محاسبات ابتدا به ساکن و بسته محاسباتی WANNIER90 است که توابع بیشینه جایگزیده وانیر را به روشی که در این فصل به آن اشاره شد، به دست می‌دهد [۲۷].

برای بررسی پایه‌های بهینه در رھیافت FPLO، از دنباله‌ی شناخته شده زیر برای حالات بلوخ شروع می‌کنیم:

$$\psi_{n\mathbf{k}} = \langle \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{k}n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R\mathbf{s}L} \phi_{\mathbf{s}L}(\mathbf{r} - R - \mathbf{s}) C_{L\mathbf{s},n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(R+\mathbf{s})} \quad (1.2)$$

که در آن

$$\phi_{\mathbf{s}L} = \langle \hat{\mathbf{r}} | R\mathbf{s}L \rangle = \phi_{\mathbf{s}}^l(|\mathbf{r} - R - \mathbf{s}|) Y_L(\mathbf{r} - R - \mathbf{s}) \quad (2.2)$$

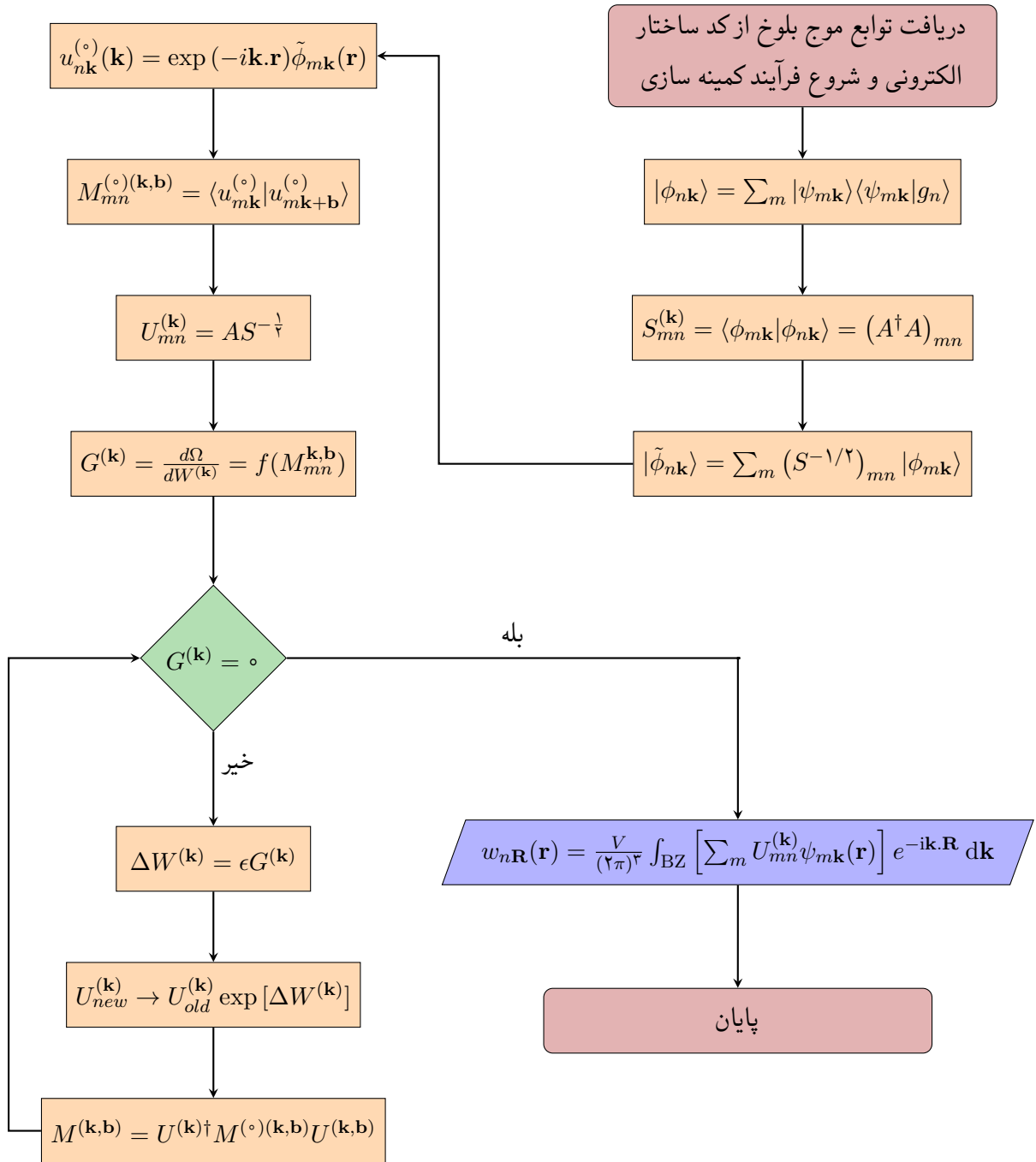
حالات پایه‌ی  $\phi_{\mathbf{s}L}$  اوربیتال‌های جایگزیده‌ی شبه اتمی مرکزیت یافته در مکان  $\mathbf{s}$  و در یاخته‌ی شبکه  $R$  هستند که جوابی برای معادله شرودینگر شبه اتمی با پتانسیل کروی به شکل زیر بوده و با مجموعه کاملی از اعداد کوانتومی  $L = \{\rho, l, m\}$  تعریف می‌شوند که چندین اوربیتال با یک  $L$  نیز در آن مجاز است [۲۸].

$$v^{at}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int v(\mathbf{r} - R - \mathbf{s}) d\Omega + v^{conf} \quad (3.2)$$

<sup>۱</sup>Full Potential Local Orbital

<sup>۲</sup>Density Functional Theory

<sup>۳</sup>Linear Combination of Atomic Orbitals



شکل ۱.۲ - روندنمای محاسبه‌ی توابع وانیرر بیشینه جایگزیده

قسمت اول معادله‌ی فوق میانگین پتانسیل کروی بلور است در حالی که بخش دوم یک پتانسیل محدود کننده به شکل زیر می‌باشد:

$$v^{conf} = \left(\frac{1}{r_0}\right)^4 \quad (4.2)$$

معادله ویژه‌مقداری که باید حل شود به صورت زیر است:

$$HC = SC\epsilon \quad (5.2)$$

که  $C$  ماتریس ضرایبی است که  $C_{Ls,nk}$  المانهای آن را تشکیل می‌دهند. ماتریس هامیلتونی و ماتریس همپوشانی به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$H_{s'L',sL} = \sum_R \langle \mathbf{0}s'L' | \hat{H} | R s L \rangle e^{i\mathbf{k}(R+s-s')} \quad (6.2)$$

$$S_{s'L',sL} = \sum_R \langle \mathbf{0}s'L' | R s L \rangle e^{i\mathbf{k}(R+s-s')} \quad (7.2)$$

در حالت کلی پایه‌ها نامتعامل در نظر گرفته می‌شوند. به طور معمول برای جلوگیری از مواجهه با مسأله‌ی قطری‌سازی ماتریس‌های بزرگ و غیرضروری که موجب افزایش محاسبات رایانه‌ای می‌شود، حالات پایه‌ی جایگزیده به دو دسته‌ی حالات مغزه‌ی<sup>۱</sup>  $\phi_{s,L,c}$  و حالات ظرفیت  $\phi_{s,L,v}$  تقسیم می‌شوند. چون اوربیتال‌های مغزه در نقاط مختلف شبکه به شدت جایگزیده هستند، برهم‌نهی آنها قابل صرف نظر کردن است. از این رو حالات مغزه را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$\langle R's'L' | R s L_c \rangle = \delta_{cc'} \delta_{RR'} \delta_{ss'} \quad (8.2)$$

که جوابی برابر یک دارد و ما را مجاز به جداسازی حالات مغزه و ظرفیت می‌کند. برای ماتریس همپوشانی داریم:

$$S = \begin{pmatrix} S_{cc} & S_{cv} \\ S_{vc} & S_{vv} \end{pmatrix} \quad (9.2)$$

که در آن:

$$S_{cc} = \langle R's'c' | R s c \rangle = \delta_{cc'} \delta_{R+s,R'+s'}$$

$$S_{cv} = \langle R's'c' | R s v \rangle$$

<sup>۱</sup>core

$$S_{vc} = \langle R's'v' | Rsc \rangle = S_{cv}^\dagger$$

$$S_{vv} = \langle R's'v' | Rsv \rangle$$

زیروند c به حالات مغزه، زیروند v به حالات ظرفیت و جایی که این مرزبندی مهم نباید از زیروند L استفاده شده است. حال ماتریس همپوشانی را با استفاده از قاعده‌ی تجزیه چولسکی<sup>۱</sup> [۲۹] و با استفاده از تعاریف فوق تجزیه می‌کنیم:

$$S = \begin{pmatrix} 1 & S_{cv} \\ S_{vc} & S_{vv} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ S_{vc} & S_{vv}^L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & S_{cv} \\ 0 & S_{vv}^R \end{pmatrix} = S^L S^R \quad (10.2)$$

که در آن ماتریس‌های بالا و پایین مثلثی  $S_{vv}^L$  و  $S_{vv}^R$  از رابطه‌ی

$$S_{vv}^L S_{vv}^R = S_{vv} - S_{vc} S_{cv} \quad (11.2)$$

پیروی می‌کنند. معکوس ماتریس‌های حاصل از تجزیه‌ی چولسکی که بعداً در معادله ویژه مقداری از آنها استفاده می‌کنیم به شکل زیر است:

$$S^{L-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -S_{vv}^L S_{vc} & S_{vv}^{L-1} \end{pmatrix}, \quad S^{R-1} = \begin{pmatrix} 1 & -S_{cv} S_{vv}^{R-1} \\ 0 & S_{vv}^{R-1} \end{pmatrix} \quad (12.2)$$

برای ماتریس هامیلتونی نیز داریم:

$$H = \begin{pmatrix} H_{CC} & H_{cv} S_{cv} \\ S_{vc} H_{vc} & H_{vv} \end{pmatrix} \quad (13.2)$$

که عمومیّت دادن تفکیک میدان بلوری برای درجات مغزه به شکل  $H_{cc} = \epsilon_{sc'c} \delta_{R'+s', R+s}$  هیچ مشکلی ایجاد نمی‌کند. لذا با استفاده از تعریف حالات مغزه و ظرفیت:

$$H_{cc} = \langle R's'c' | H | Rsc \rangle = \epsilon_{sc} \delta_{cc'} \delta_{R+s, R'+s'}$$

$$H_{vv} = \langle R's'c' | H | Rsv \rangle$$

<sup>۱</sup>Cholesky decomposition

ماتریس هامیلتونی به شکل زیر خواهد بود:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_c \backslash & \epsilon S_{cv} \\ S_{vc} \epsilon_c & H_{vv}^R \end{pmatrix}, \quad \epsilon_c = \text{diag}(\dots, \epsilon_s L_c, \dots) \quad (14.2)$$

در حقیقت المانهای ماتریسهای مغزه-ظرفیّت و ظرفیّت-ظرفیّت شامل انتگرالهای تک مرکزی و چند مرکزی می‌شوند. المان درون مکانی به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} \langle sL' | H | sL \rangle &= \langle sL' | -\frac{\Delta}{\gamma} + \sum_{L_1} v_{sL_1} (|\mathbf{r} - \mathbf{s}|) Y_{L_1}(\mathbf{r} - \mathbf{s}) | sL \rangle \\ &+ \langle sL' | \sum_{R'+s'(\neq s), L_1} v_{sL_1} (|\mathbf{r} - R' - s'|) Y_{L_1}(\mathbf{r} - R' - s') | sL \rangle \end{aligned} \quad (15.2)$$

عبارت دوّم شامل قسمت خارجی پتانسیل بلوری در مکان  $s$  می‌شود که عبارتی دو مرکزی است. المانهای خارج از مکان برای  $s \neq R + s$  به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} \langle s'L' | H | RsL \rangle &= \langle s'L' | -\frac{\Delta}{\gamma} + \sum_{L_1} v_{s'L_1} (|\mathbf{r} - s'|) Y_{L_1}(\mathbf{r} - s') | sL \rangle \\ &+ \sum_{L_2} v_{sL_2} (|\mathbf{r} - R - s|) Y_{L_2}(\mathbf{r} - R - s) | RsL \rangle \\ &+ \langle s'L' | \sum_{(s'' \neq) R'' + s'' (\neq R+s), L_1} v_{s''L_1} (|\mathbf{r} - R'' - s''|) Y_{L_1}(\mathbf{r} - R'' - s'') | sL \rangle \end{aligned} \quad (16.2)$$

که در سطر اوّال و دوّم هر انتگرال دو مرکزی است و در سطر سوّم عبارات سه مرکزی هستند اما امکان حل آنها وجود دارد [۲۵].

می‌توان معادله ویژه مقداری را بازنویسی نمود:

$$(s^L)^{-1} H (S^R)^{-1} (S^R C) = (S^R C) \epsilon \quad (17.2)$$

با قراردادن  $S^R C = \tilde{C}$  که در آن ماتریس یکانی قطری شده‌ی  $S^{L-1} H S^{R-1}$  است و قسمت‌های مغزه-مغزه  $-cc-$  آن نیز قطری و برابر یک است می‌توان این معادله ما را به شکل کاهش یافته‌ی زیر نوشت:

$$\tilde{H}_{vv} \tilde{C}_{vv} = \tilde{C}_{vv} \epsilon_v \quad (18.2)$$

در اینجا اشاره می‌کنیم که قسمت‌های مغزه-ظرفیّت  $-cv-$  عبارت  $S^{L-1} H S^{R-1}$  حذف شده و از این رو  $\tilde{C}_{cv} = 0$

و معادله‌ی ویژه مقداری کاهش یافته فوق را به دست می‌دهد که در آن تعریف زیر صادق است:

$$\tilde{H}_{vv} = (S_{vv}^L)^{-1} (H_{vv} - S_{vc} H_{cc} S_{cv}) (S_{vv}^R)^{-1} \quad (19.2)$$

به این ترتیب برای ماتریس ضرایب نیز خواهیم داشت:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -S_{cv} (S_{vv}^R)^{-1} \tilde{C}_{vv} \\ 0 & (S_{vv}^R)^{-1} \tilde{C}_{vv} \end{pmatrix} \quad (20.2)$$

در مورد تقریب‌های به کار رفته در این روش و همچنین محاسبات مربوط به بخش نسیتی آن می‌توان به مقالات کوپرنیک<sup>۱</sup> و همکارانش مراجعه نمود [۳۰-۳۲].

### ۱.۱.۲ بهینه‌سازی پایه‌ها

یک از ویژگی‌های مهم FPLO بهینه شدن پایه‌ها در هر دور از چرخه محاسبات خودسازگار است. بر این اساس پایه مورد استفاده برای حالات مغزه از معادله زیر پیروی می‌کنند:

$$(\hat{t} + v_s^{at}) \phi_{sL_c} = \phi_{sL_c} \epsilon_{sL_c} \quad (21.2)$$

که در آن  $v_s^{at}$  متوسط پتانسیل کروی حول مکان  $s$  است. این تعریف متضمن آن است که جمع روی اوربیتال‌های مغزه و ویژه‌مقادیر مربوط به آن تقریب بسیار خوبی برای جواب هامیلتونی بلور هستند. در مقابل پایه‌های مورد استفاده برای اوربیتال‌های ظرفیت به شیوه‌ی زیر تعریف می‌شوند:

$$\left( \hat{t} + v_s^{at} + \left( \frac{r}{r_{sL_v}} \right)^4 \right) \phi_{sL_v} = \phi_{sL_v} \epsilon_{sL_v} \quad (22.2)$$

که در آن  $r_{sL_v} = (r_{NN}(s)x_{0L_v}/2)^{\frac{1}{4}}$  است و  $r_{NN}$  فاصله نزدیکترین همسایه و  $x_{0L_v}$  شاخصی تراکم بدون بعد است. جمله‌ی توانی اضافه شده به هامیلتونی، یک پتانسیل محدودکننده است که تأثیر آن حذف دنباله‌ی بلند اوربیتال‌های ظرفیت و محدود کردن این اوربیتال‌ها در یک شعاع معین است. پتانسیل محدودکننده تأثیر کمی روی ناحیه‌ی مغزه دارد در حالیکه در نواحی دور از هسته، اوربیتال‌های ظرفیت دستخوش تغییرات چشم‌گیری می‌شوند. تأثیر دیگر و حتی مهم‌تر محدودسازی اوربیتال‌های ظرفیت این است که اوربیتال‌های تشدید انرژی در جهت نزدیک شدن به مرکز نواری بالا کشیده شده و انحنای بهینه‌ای از این اوربیتال‌ها را ایجاد می‌کنند.

با توجه به وابستگی پایه‌ها به شاخصی  $x_0$ ، انرژی کل نیز به  $x_0$  وابسته است. در نرم‌افزار FPLO از این ویژگی برای بهینه‌سازی پایه‌ها استفاده شده است. به عبارت دیگر، ویژگی راهبردی FPLO این است که انرژی کل با توجه به

<sup>۱</sup>Klaus Keopernik



مجموعه‌ای از شاخصه‌های تراکم کمینه می‌شود. در نتیجه باید گفت FPLO رهیافتی با پایه‌های متغیر و قابل تنظیم است.

با استفاده از رابطه‌ای شبیه به رابطه‌ی محاسبه‌ی نیرو طبق قضیه‌ی هلمن-فاینمن می‌توان به قاعده زیر رسید:

$$\partial_{x_0} E^{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{nk}}^{\epsilon F} \partial_{x_0} \epsilon_{\mathbf{nk}} - \int n(\mathbf{r}) \partial_{x_0} V^{cr}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (23.2)$$

با استفاده از  $\partial_{x_0} N = \int \partial_{x_0} n(\mathbf{r}) \equiv 0$  و اگر پایه‌ها یک مجموعه‌ی کامل را تشکیل دهند، سمت راست معادله فوق برای تمام  $x_0$  ها دقیقاً صفر می‌شود. از آنجایی که پایه‌های FPLO کامل نیستند، ما با صفر قرار دادن  $\partial_{x_0} E^{\text{tot}}$ ، معادله‌ی ماتریس مورد نیاز را برای محاسبه‌ی پارامتر تراکم به دست می‌آوریم و همراه با حل معادلات کان-شم در هر چرخه این معادلات ماتریسی نیز حل می‌شوند. بهینه‌سازی پایه‌ها تأثیر زیادی در افزایش دقت و کارایی محاسبات FPLO دارد. طبق یک قاعده‌ی سرانگشتی، بسته به مقدار اولیه‌ی  $x_0$ ، محاسبات همراه با بهینه‌سازی پایه‌ها، تعداد چرخه‌ای حدوداً ۱/۵ تا ۳ برابر بیشتر از محاسبات بدون بهینه‌سازی پایه‌ها دارد.

## ۲.۱.۲ محاسبات نسبیتی در FPLO

محاسبات نسبیتی در FPLO با استفاده از حل معادله کان-شم-دیراک در تقریب چگالی اسپینی موضعی<sup>۱</sup> (LSDA) انجام می‌پذیرد [۲۶، ۳۰، ۳۱].

$$\hat{H}|\mathbf{kn}\rangle = [-i\alpha\nabla + \beta\hat{\sigma} + V^{cr} + \beta\Sigma_z\mathbf{B}^{cr}]|\mathbf{kn}\rangle \quad (24.2)$$

با استفاده از میدان تبدلی-همبستگی  $\hat{\sigma} \equiv B^{cr}$  ارائه شده در تقریب هم‌خط<sup>۲</sup> و هم خط‌سازی در راستای محور انتخابی  $\hat{z}$  داریم:

$$\mathbf{B}^{cr}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4}(V_{xc}^+[n, m] - V_{xc}^-[n, m]) \quad (25.2)$$

به طور معمول پتانسیل مؤثر  $V^{cr}$  در رابطه ۲۴.۲ شامل پتانسیل خارجی  $V$ ، پتانسیل هارتری و پتانسیل تبدلی-همبستگی  $V_{xc}$  می‌شود:

$$V^{cr}(\mathbf{r}) = \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' - \sum_{R_s} \frac{Z_s}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_s|} + \frac{1}{4}(V_{xc}^+[n, m] - V_{xc}^-[n, m]) \quad (26.2)$$

در معادلات فوق  $c$  سرعت نور و  $\alpha$ ،  $\beta$  و  $\Sigma_z$  ماتریس‌های  $4 \times 4$  پائولی و دیراک هستند. بر خلاف سایر روش‌های ساختار نواری نسبیتی، در محاسبات نسبیتی FPLO معادله ۲۴.۲ در یک فرمولبندی چهار مؤلفه‌ای ماتریسی حل

<sup>۱</sup>Local Spin Density Approximation

<sup>۲</sup>Collinear Approximation

می‌شود که موجب عدم استفاده از سایر تقریب‌ها نظیر راهبرد مشتقات دوم می‌گردد. این مدل یک بسط نسبیتی از همان چیزی است که در ابتدای ۱۰۲ به آن اشاره شد و امکان بررسی تأثیرات نسبیتی را با همان دقت قبل فراهم می‌کند به نحوی که تفاوت انرژی محاسبات غیر نسبیتی و نسبیتی حتی برای محاسبات مربوط به فلزات سنگین‌تر در حدود میکروهارتری است. برای محاسبات مربوط به بهینه‌سازی پایه‌ها در حالت نسبیتی و همین‌طور رهیافت محاسبات نسبیتی اسکالر<sup>۱</sup> می‌توان به مقالات کوپرنیک و دیگران و همین‌طور کتب مربوط به محاسبات نظریه تابعی چگال نسبیتی رجوع نمود [۳۳، ۳۴].

---

<sup>۱</sup>Scalar Relativistic

## فصل ۳

# یک راهنما

### ۱.۳ نمونه لغات

#### قضیه ۱

اگر  $A$  و  $B$  آن‌گاه  $C$ .

در قضیه ۱ داریم ...

کلمه

برای وارد کردن یک واژه از دستور `glspl` باید استفاده نمود. مثل واژه متغیرهای تصادفی<sup>۱</sup> که اگر در فایل `TEX` آن نگاه کنید، مشاهده می‌کنید که برای وارد کردن واژه متغیرهای تصادفی از دستور `glspl` استفاده شده است. در ضمن در اولین استفاده از این واژه، معادل انگلیسی آن نیز پاورقی خورده است. و اکنون واژه بهینه‌سازی<sup>۲</sup> را تعریف می‌کنیم. از اختصارات، اختصارات `BAN` و `CDMA`<sup>۳</sup> را وارد می‌کنیم. برای بار اول پاورقی می‌خورد. اما برای بار دوم پاورقی زده نمی‌شود. دقت کنید که کلمه اول یعنی چون از `gls*` استفاده شده است، بار اول به حساب نمی‌آید. از اختصارات، اختصارات `BAN`<sup>۴</sup> و `CDMA` را وارد می‌کنیم. از اختصارات، اختصارات `BAN` و `CDMA` را وارد می‌کنیم.

تا واژه و یا اختصاری را در متن با دستورات `gls` و `glspl` وارد نکنید، واژه نه در متن ظاهر شده و نه در واژه‌نامه‌ها وارد می‌شود. [۳۵، ۳۶] [۳۷] استفاده از واژه‌ها و اختصارات

در بسته `glossaries` روش‌های مختلفی برای فراخوانی واژه‌ها و اختصارات قرار داده شده است. در ادامه به صورت مختصر این مطلب را توضیح می‌دهیم. دقت کنید که آرگومان ورودی تمامی دستورات یاد شده، `label` واژه و یا اختصار تعریف شده است. `gls`

با این دستور معادل فارسی واژه یاد شده در مکانی که این دستور را قرار داده‌اید وارد می‌شود. مثال فرض کنید در

---

<sup>۱</sup>Random Variable

<sup>۲</sup>Optimization

<sup>۳</sup>Code Division Multiplexing Access

<sup>۴</sup>Body Area Network

قسمت واژه‌نامه، واژه‌ای به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

اکنون اگر در فایل `tex` خود می‌نویسیم.

یک ربات در مجموع تعدادی کنش می‌تواند انجام دهد

خروجی `pdf` به صورت زیر خواهد شد.

یک ربات در مجموع تعدادی کنش می‌تواند انجام دهد

در ضمن اگر این اولین باری است که از این واژه استفاده می‌کنیم، به طور خودکار معادل انگلیسی واژه استفاده شده یعنی کنش که `Action` است، در پاورقی وارد می‌شود.

برای اختصارات، نیز فرض کنید اختصاری به صورت زیر تعریف کرده‌ایم.

اکنون در متن خود برای وارد کردن `DFT` می‌توانید از دستور `gls` استفاده کنید.

یکی از تبدیلات مهم <sup>۱</sup>`DFT` است.

آن‌چه که شما در خروجی `pdf` خواهید دید به صورت زیر خواهد شد.

یکی از تبدیلات مهم `DFT` است.

در ضمن اگر این اولین باری است که از این اختصار استفاده می‌کنیم، به طور خودکار حالت باز شده آن یعنی `Transform, Fourier Discrete` در پاورقی وارد می‌شود. `glspl`

با استفاده از این دستور می‌توانید حالت جمع یک واژه را در متن وارد کنید. بار دیگر فرض کنید که واژه‌ای به صورت زیر در قسمت واژگان تعریف کرده‌اید.

اکنون فرض کنید که در متن فایل `tex` خود عبارت زیر را نوشته‌اید.

مجموع متغیرهای تصادفی را می‌توان به صورت

خروجی فایل `pdf` چیزی شبیه به صورت زیر خواهد شد.

مجموع متغیرهای تصادفی را می‌توان به صورت

همان‌طور که مشاهده می‌کنید حالت جمع واژه `RandomVariable` قرار داده شده است. در ضمن اگر این کلمه برای اولین بار مورد استفاده قرار گرفته است، معادل انگلیسی حالت مقرر آن یعنی `Variable Random` در پاورقی وارد می‌شود. `*glspl` و `*gls`

این دستورات به مانند `glspl` و `gls` عمل می‌کند. یعنی حالت مفرد یا جمع واژه را در متن می‌گذارد، واژه را در واژه‌نامه‌ها وارد می‌کند. اما اگر اولین مرتبه‌ای است که واژه فراخوانی می‌شود آن را پاورقی نمی‌زند. به عنوان مثال متن زیر را در نظر بگیرید.

یک ربات در مجموع تعدادی کنش‌ها می‌تواند انجام دهد. اما کنش‌ها یک ربات را می‌توان

در خروجی `pdf`، در هر دو حالت قسمت حالت جمع واژه با برچسب `Action` قرار می‌گیرد. اما با این‌که در اولین جمله اولین باری است که کلمه `Action` آمده است، این کلمه پاورقی نمی‌خورد. و اولین بار فراخوانی واژه `Action` در جمله دوم در نظر گرفته می‌شود و همان‌جا نیز پاورقی ایجاد خواهد شد.

<sup>۱</sup>Discrete Fourier Transform



شکل ۱.۳ - این مثالی از یک کنش مجاز است.

اما سوال این جا است که این حالت \* به چه کار خواهد آمد؟ فرض کنید که شما می‌خواهید در caption یک جدول یا شکل یک واژه را بکار ببرید. مثلاً فرض کنید.

همان‌طور که می‌دانید caption ها اشکال در فهرست اشکال جمع‌آوری می‌شوند، و به احتمال زیاد اولین جایی که واژه Action بکار می‌رود در caption ها است که در فهرست اشکال آورده شده است. پرواضح است که ما نمی‌خواهیم در فهرست اشکال پاورقی داشته باشیم. پس بهتر است که در caption جداول و اشکال از حالت \* دستورات استفاده کنیم. یعنی:

`glsentrytext`

این دستور به مانند `gls` است. با این تفاوت که فقط در متن قسمت `text` اختصار یا واژه مورد نظر وارد می‌شود، و واژه مورد نظر نه پاورقی می‌خورد و نه در واژه‌نامه‌ها وارد می‌شود. برای واژه و اختصار زیر را در نظر بگیرید.

اکنون اگر در متن خود بنویسید:

می‌توانیم با بهینه‌سازی تبدیل DFT را

شما در خروجی pdf عبارت زیر را مشاهده خواهید کرد.

می‌توانیم با بهینه‌سازی تبدیل DFT را

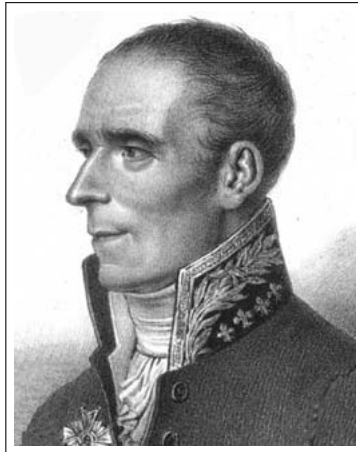
اما واژه Optimization و اختصار DFT اگر در این جا حتی اولین باری باشد که بکار رفته باشد، دیگر پاورقی

نخواهد خورد، در ضمن این واژه و اختصار وارد واژه‌نامه و فهرست اختصارات نیز نخواهد شد. `glsentryplural`



شکل ۲.۳ - این مثالی از یک کنش مجاز است.

این دستور به مانند `glspl` است. با این تفاوت که فقط در متن قسمت جمع واژه مورد نظر وارد می‌شود، و واژه مورد نظر نه پاورقی می‌خورد و نه در واژه‌نامه‌ها وارد می‌شود. `glsuseri` اگر از این دستور استفاده کنید، واژه و یا اختصار در متن نمی‌آید اما در واژه‌نامه و یا فهرست اختصارات وارد می‌شود.



شکل ۳.۳ - پیر سیمون لاپلاس

پیوست الف

مدیریت مراجع در تک



## پیوست ب

# اتصال بسته محاسباتی FPLO و Wannier90

### ب.۱ چگالی حالات هیبریدی و هیبریدی منطقه ای

ت به غیر از پوشه‌ی FPLO2WAN پوشه دیگری نیز تولید می‌شود که به صورت پیش فرض TEMP نام‌گذاری شده است. و به بخش‌های زیر تقسیم می‌شود:

• **waves** شامل فایل‌هایی به تعداد تمام نقاط  $k$  - مثلاً تعداد  $1 \times 1 \times 16$  عدد فایل - می‌باشد که توابع موج بر روی مش بندی بنیادی در همه نوارهای دلخواه که در ورودی شماره آنها را وارد شده است و از فایل حجیم +gridscfpsi.g001 استخراج می‌شوند. این کار امکان دسترسی به بخش‌های مطلوب تابع موج با بارگذاری باینری آنها را فراهم می‌آورد و به محاسبات سرعت می‌بخشد. به علاوه چنانچه نیاز برای محاسبه بر روی تعداد دیگری از توابع هیبریدی وجود داشته باشد از قطعه قطعه نمودن مجدد فایل سنگین تابع موج اجتناب می‌کند و می‌توان فایل‌های تقسیم شده را با استفاده از دستور زیر در هنگام اجرای برنامه به عنوان ورودی وارد نمود.

```
1 ~$ fplo2wannier -t TEMP
```

h	g	f	d	p	s	n
					۱	۱
				۳	۲	۲
			۷	۵	۴	۳
		۱۳	۱۰	۸	۶	۴
	۲۱	۱۷	۱۴	۱۱	۹	۵
۳۷	۳۲	۲۷	۲۳	۱۹	۱۶	۶

جدول ب.۱ - توالی انرژی برای زیرلایه‌ها بر اساس اعداد کوانتومی آنها. شماره لایه ( $n$ ) در ستون اول و هر خانه مشخص‌کننده ترتیب الکترون‌گیری اربیتال مربوطه است. تعداد الکترون‌ها اختصاص یافته به هر اربیتال وابسته به محاسبه و مواد شرکت‌کننده در محاسبه است. [۳۸]

- **points** حاوی مشبندی دکارتی شبکه می‌باشد که توابع موج در آن نقاط داده شده است. این نقاط از تقسیم‌بندی بردارهای شبکه به تعداد بخش‌های وارد شده در زیرمنوی grid در رابط Fedit ایجاد می‌شوند. این مشبندی باید آنقدر زیاد باشد تا توابع موج ایجاد شده در فرایند بهنجارش انتگرالی برابر یک داشته باشند که مسأله‌ی بهنجارش در هنگام خواند توابع موج توسط FPLO2WANNIER بررسی شده و چنانچه این توابع بهنجار نباشند با ارائه‌ی خطا از برنامه خارج می‌شود.
- **data** که حاوی اطلاعات به دست آمده از خوانش فایل‌های خروجی FPLO بوده و برای اینکه کاربر مجبور نشود در هر بار محاسبه یک بار فایل تابع موج را قطعه قطعه کند ایجاد شده است. چنانچه در توسعه‌های بعدی خواهان اضافه کردن بخشی برای قطع و ادامه محاسبات باشیم وجود این فایل کمک می‌کند. این فایل حاوی اکثر متغیرهای به کار رفته در برنامه نیز می‌باشد که با استفاده از ابزار لغت‌نامه<sup>۱</sup> در زبان برنامه نویسی پایتون که برنامه FPLO2WANNIER با آن نوشته شده است ایجاد و خوانده می‌شود.

نامه موجود در بسته‌ی WANNIER90 یعنی kmesh.pl برای تقسیم‌بندی منطقه اول بر مبنای متفاوتی از بسته‌ی FPLO -اول محور z را و بعد y و z را مشبندی می‌کند- کار می‌کند.

```

1  #!/usr/bin/python3 -u
2  from sys import argv
3  arg=[int(x) for x in argv[1:4]]
4  xtcl=1.0/arg[0]
5  ytcl=1.0/arg[1]
6  ztcl=1.0/arg[2]
7  x,y,z=0.0,0.0,0.0
8  with open("./wankp","w") as f:
9      f.write("%s f 1 1 \n"%(arg[0]*arg[1]*arg[2]))
10
11 for z in range(arg[2]):
12     for y in range(arg[1]):
13         for x in range(arg[0]):
14             with open("./=.kp","a") as f:
15                 f.write("%s %s %s\n"%(repr(x*xtcl).ljust(20),
16                                     repr(y*ytcl).ljust(20),repr(z*ztcl).ljust(20)))
17                 print("%s %s %s\n"%(repr(x*xtcl).ljust(20),
18                                     repr(y*ytcl).ljust(20),repr(z*ztcl).ljust(20)))

```

<sup>۱</sup>Dictionary

## پیوست پ

# معرفی ورودی‌ها و خروجی‌ها

به طور کلی ورودی برنامه FPLO2WANNIER به شرح زیر است.

- **+symmetry** و یا **+symminfo** که هر دو به صورت خودکار توسط FPLO و Fedit تولید و شامل نگاشت‌های مربوط به نقاط هم ارز در منطقه اول بریلوئن است و در انتهای آن بردارهای شبکه و شبکه وارون و تبدیل‌های آنها آمده است که این قسمت توسط برنامه FPLO2WANNIER استخراج می‌شود و در خروجی نیز چاپ می‌گردد.
- **+gridscfpsi.g001** فایل تابع موج که توسط زیر پنجره grid از رابط کاربری fedit تنظیمات مشبندی آن انجام می‌گیرد همچنین می‌توان دامنه انرژی در این قسمت تعیین کرد و باید توجه داشت که ابتدای این دامنه در یک گاف انرژی بوده و با دامنه‌ی انرژی که در زیر پنجره‌ی bandplot تعیین می‌شود یکسان باشد. نام آن اختیاری است و در توضیحات مربوط به این فایل در دستورالعمل FPLO آمده است [۳۹].
- **wannier.wout** که از محاسبات مقدماتی<sup>۱</sup> بسته wannier90 به دست می‌آید. از این فایل بردارهای همسایگی اول استخراج می‌شود. wannier یک نام پیش فرض است.
- **=.kp** که از آن نقاط مشبندی منطقه اول بریلوئن استخراج می‌شود. در ابتدای پروژه این فایل استفاده می‌شد ولی اکنون می‌توان با تغییراتی نیاز به این فایل را حذف نمود که این کار هنوز انجام نشده است. البته این فایل برای استخراج ویژه مقادیر انرژی در نقاط مختلف شبکه وارون نیز استفاده می‌شود؛ لذا بایستی آن را متناسب با مشبندی شبکه وارون و با استفاده از xfplo -fs ایجاد کرد. برای این منظور در پنجره‌ی گرافیکی برنامه، در بخش mesh تعداد **k** مشخص می‌شود.
- **+band\_kp** ویژه مقادیر روی مشبندی شبکه وارون را که در فایل =.kp آمده به دست می‌دهد و برای استخراج آن باید تنظیماتی در زیر پنجره‌ی bandplot در Fedit انجام داد. فایل wannier.win که حامل اطلاعات مربوط به ورودی اجرای برنامه wannier90 به اضافه‌ی کلیدهای اضافی است که ورودی‌های برنامه FPLO2WANNIER می‌باشند. ورودی wannier.win اجرای FPLO از روی این فایل ساخته می‌شود.

در فایل wannier.win به جز آنچه در دستورالعمل بسته محاسباتی wannier90 آمده است گزینه‌های زیر قابل انتخاب است [۴۰]. انتخاب‌های زیر صرفاً در هنگام اجرای FPLO2WANNIER کاربرد دارند و برای اجراهای مربوط به wannier90 بدون کاربرد بوده و باید غیرفعال باشند که در این زمینه FPLO2WANNIER هم مانند wannier90 از علامت‌های ! و # استفاده می‌کند.

---

<sup>۱</sup>Postprocceing

- **special\_bands** شماره نوارهایی که می‌خواهیم روی آنها محاسبات FPLO2WANNIER انجام شود در مقابل این کلید وارد می‌شوند. این شماره‌ها بر اساس شماره‌های به دست آمده از شماره ستون نوارهای فایل band\_kp+ است؛ به این ترتیب که ستون اول در این فایل نقاط منطقه اول و ستون‌های بعدی مربوط به نوار اول تا nام هستند. می‌توان دامنه‌ای از نوارها را با - مشخص نمود. به عنوان مثال:

```
1 special_bands 1,2,5-7
```

نوارهای ۱،۲،۵،۶ و ۷ را از سایر نوارها جدا می‌کند.

- **energy\_dos** شامل سه عدد که به ترتیب ابتدا، انتها، و تعداد بازه‌های انرژی برای چگالی حالات تصویر رامی‌گیرد.

```
1 energy_dos -15 0 1000
```

در این مثال بازه انرژی تا الکترون‌ولت به قسمت تقسیم می‌شود تا چگالی حالات روی آنها حساب شود.

- **dos\_sigma** می‌تواند مقدار پهن‌شدگی تابع گاوسی در محاسبه چگالی حالات را تغییر دهد.

```
1 dos_sigma 0.2
```

- **exclude\_bands** شماره نوارهایی که در این جا آمده باشند از لیست محاسبه حذف می‌شوند. در حال حاضر در کد پس از حذف این نوارها برچسب دهی به نوارهای باقی مانده به ترتیب خواهد بود. به عبارتی اگر ده نوار داشته باشیم و نوار ۹ و ۵ را حذف کنیم نوارهای از یک تا ۸ برچسب می‌خورند و ساختار به این شکل محاسبه می‌شود. درستی این کار هنوز بررسی نشده است اما این گزینه در بسته wannier90 وجود دارد. قاعده دامنه نوارها که قبلاً برای special\_bands بیان شد در این مورد نیز صادق است.

- **dos\_projections** بخش تصویرهای چگالی حالات به شکل زیر تعریف می‌شود و نوع تابع هیبریدی را که می‌خواهیم تصویر را روی آن مشخص کنیم به دست می‌دهد. می‌توان یک تقریب از چگالی حالت منطقه‌ای نیز با وارد کردن مختصات به دست آورد. دقت شود که برای به دست آوردن توابع تصویر باید در قسمت special\_bands به تعداد الکترون‌هایی که اوربیتال مذکور در کل شرکت می‌دهد توجه داشت و همان نوارها را نیز مشخص نمود.

```
1 begin dos_projections
2 c=0.0,0.0,0.0:s
3 end dos_projections
```

و یا

```
1 begin dos_projections
2 c=0.0,0.0,0.0:dx2-y2
3 end dos_projections
```

هر دوی این موارد در مبدأ بررسی شده اند. این که خود کد بر اساس تعداد الکترون‌های ظرفیت مشخص کند کدام نوار مربوط به کدام اوربیتال است خود یک پروژه کدنویسی است که فرصت آن در این پایان‌نامه پیش نیامد و اکنون فقط می‌توان از طریق فایل ورودی wannier.win نوارهای اوربیتال مذکور را مشخص نمود تا کد تصویر چگالی حالات روی حالت هیبریدی دلخواه را محاسبه کند.

- توابع حدس گاوسی به شکل زیر تعریف می‌شوند و از تابع گاوسی برای تولید یک فایل wannierfr.amn استفاده می‌کنند.

```
1 frprojections c=0,0,0:sigmafr=9
```

عدد sigmafr مقدار  $\sigma$  را در معادله گاوس مشخص می‌کند. [۴۱]

$$\sigma(\varepsilon - \varepsilon_i(\mathbf{k})) \rightarrow \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_i(\mathbf{k}))^2}{\sigma^2}\right) \quad (1.پ)$$

این توابع بیشتر برای امتحان کردن کد با توابع اولیه مختلف ایجاد شده‌اند.

خروجی‌های برنامه FPLO2WANNIER به صورت پیشفرض در یک پوشه به نام FPLO2WAN تولید می‌شوند. فایل‌های زیر بعد از اجرا در آن به وجود می‌آیند.

- **wannier.win** بازنویسی فایل ورودی با همین نام بدون کلیدهای مربوط به برنامه FPLO2WANNIER است تا اجرای wannier90 بدون خطا باشد.

- **wannier.mmn** حاوی ماتریس  $M_{mn}^{(k,b)}$  یعنی مجموعه انتگرال‌های بخش دوره‌ای تابع موج و همسایگی‌های اول آن‌ها می‌شود که در معادله‌ی؟؟ معرفی شده است. این فایل با استخراج توابع موج از بسته محاسباتی FPLO تولید و بررسی شد. برای این منظور ابتدا لازم بود بهنجار بودن توابع موج خروجی FPLO بررسی شود. پس از مطالعه و کدنویسی‌های فراوان و استفاده از دو روش مختلف انتگرال‌گیری - جمع روی توابع و انتگرال‌گیری سه‌خطی<sup>۱</sup> [۴۲]- که جواب‌های یکسانی ارائه کرده‌اند توانستیم فایل‌ی بزرگ - در حدود چند ده گیگابایت! که همان فایل‌های خروجی FPLO با عنوان gridscfpsi.g001+ است - استخراج کنیم که محتوای آن توابع موج به هنجار در تمامی نقاط منطقه اول بریلوئن است. چون این ماتریس از توابع موج استخراج می‌شود؛ لذا از انتگرال زیر برای به دست آوردن آن استفاده شده است [۹].

$$M_{mn}^{(k,b)} = \exp(-i\mathbf{b}\cdot\mathbf{r}) \langle \psi_{m\mathbf{k}} | \psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{b}} \rangle \quad (2.پ)$$

- **wannier.amn** حاوی توابع تصویر تولید شده یا همان ماتریس  $(A_{\mathbf{k}})_{mn}$  است که در معادلات بخش؟؟ به آن اشاره شد. در این فایل از ماتریس  $(A_{\mathbf{k}})_{mn}$  به شکل زیر استفاده شده است که تمامی فضا - و نه  $\frac{1}{\lambda}$  مشخص شده توسط مشبندی شبکه مستقیم - را به شکل زیر می‌پوشاند.

$$\begin{aligned} (A_{\mathbf{k}})_{mn} = & \int_0^{a_1} \int_0^{a_2} \int_0^{a_3} \psi_{m\mathbf{k}}(x, y, z) \{ g_n(x, y, z) \\ & + g_n(x - a_1, y, z) e^{ik_1 a_1} + g_n(x, y - a_2, z) e^{ik_2 a_2} \\ & + g_n(x, y, z - a_3) e^{ik_3 a_3} + g_n(x - a_1, y - a_2, z) e^{ik_1 a_1} e^{ik_2 a_2} \\ & + g_n(x - a_1, y, z - a_3) e^{ik_1 a_1} e^{ik_3 a_3} + g_n(x, y - a_2, z - a_3) e^{ik_1 a_1} e^{ik_2 a_2} \\ & + g_n(x - a_1, y - a_2, z - a_3) e^{ik_1 a_1} e^{ik_2 a_2} e^{ik_3 a_3} \} \end{aligned} \quad (3.پ)$$

- **wannier\_1.amn** همان ماتریس  $(A_{\mathbf{k}})_{mn}$  که فقط همان مشبندی  $\frac{1}{\lambda}$  فضای را داراست.

<sup>۱</sup> Trilinear Interpolation

• **xsf** اگر برنامه FPLO2WANNIER به شکل

```
1 ~$ fplo2wannier -x y
```

اجرا شود این فایل‌ها که نمایش  $g_n$ ‌های اولیه هستند می‌توان آنها را با برنامه xcrysden مشاهده نمود تولید می‌گردد. همچنین با این اجرا از برنامه فایل‌های cord نیز تولید می‌شوند. به علاوه این فایل‌ها فقط نمایش  $\frac{1}{8}$  فضای مشبندی شده است ولی یک نمونه آزمایشی از ترسیم این توابع به طور کامل در فایل‌های wannier.xsf نیز تولید می‌شود که نمایش کاملی از شکل اوربیتال‌های حدس به کار رفته در محاسبات را نشان می‌دهد.

• **cord** مختصات تغییر یافته برای توابع تصویر رامی‌دهد. هم مشبندی دکارتی و هم کروی و هم تابع تصویر مربوطه در این فایل می‌آید.

• **wannier.pds** چگالی حالات هیبریدی بدون پهن شدگی برای تابع  $g_n$  و نوارهای انتخاب شده در را ورودی می‌دهد. چنانچه انتقالی نیز وجود داشته باشد چگالی حالات هیبریدی منطقه‌ای را به دست خواهد داد.

• **wannier.pds\_sigma** چگالی حالات فوق الذکر که با توزیع گاوسی به آن یک پهن‌شدگی داده شده است را به دست می‌دهد

• **wannier.pds\_sigma\_orth** چگالی حالات فوق الذکر که با توزیع گاوسی به آن یک پهن‌شدگی داده شده است را به دست می‌دهد. تفاوت بین این فایل و فایل قبل در نوع  $g_n$  به کار رفته است که تنها منطقه مشبندی ارائه شده توسط FPLO را شامل می‌شود. به عبارت دیگر  $g_n$  در این مورد تنها جمله اول داخل آکولاد عبارت پ.۳ را در بر می‌گیرد. به علاوه یک ستون آخر این فایل چگالی حالات کل را به دست می‌دهد.

به غیر از پوشه‌ی FPLO2WAN پوشه دیگری نیز تولید می‌شود که به صورت پیش‌فرض TEMP نام‌گذاری شده است. و به بخش‌های زیر تقسیم می‌شود:

• **waves** شامل فایل‌هایی به تعداد تمام نقاط  $k$  - مثلاً تعداد  $1 \times 1 \times 16$  عدد فایل - می‌باشد که توابع موج بر روی مشبندی بنیادی در همه نوارهای دلخواه که در ورودی شماره آنها را وارد شده است و از فایل حجیم +gridscfpsi.g001 استخراج می‌شوند. این کار امکان دسترسی به بخش‌های مطلوب تابع موج با بارگذاری باینری آنها را فراهم می‌آورد و به محاسبات سرعت می‌بخشد. به علاوه چنانچه نیاز برای محاسبه بر روی تعداد دیگری از توابع هیبریدی وجود داشته باشد از قطعه قطعه نمودن مجدد فایل سنگین تابع موج اجتناب می‌کند و می‌توان فایل‌های تقسیم شده را با استفاده از دستور زیر در هنگام اجرای برنامه به عنوان ورودی وارد نمود.

```
1 ~$ fplo2wannier -t TEMP
```

• **points** حاوی مشبندی دکارتی شبکه می‌باشد که توابع موج در آن نقاط داده شده است. این نقاط از تقسیم‌بندی بردارهای شبکه به تعداد بخش‌های وارد شده در زیرمنوی grid در رابط Fedit ایجاد می‌شوند. این مشبندی باید آنقدر زیاد باشد تا توابع موج ایجاد شده در فرایند بهنجارش انتگرالی برابر یک داشته باشند که مسأله‌ی بهنجارش در هنگام خواندن توابع موج توسط FPLO2WANNIER بررسی شده و چنانچه این توابع بهنجار نباشند با ارائه‌ی خطا از برنامه خارج می‌شود.

• **data** که حاوی اطلاعات به دست آمده از خوانش فایل‌های خروجی FPLO بوده و برای اینکه کاربر مجبور نشود در هر بار محاسبه یک بار فایل تابع موج را قطعه قطعه کند ایجاد شده است. چنانچه در توسعه‌های بعدی خواهان اضافه کردن بخشی برای قطع و ادامه محاسبات باشیم وجود این فایل کمک می‌کند. این فایل حاوی اکثر متغیرهای به کار رفته

در برنامه نیز می‌باشد که با استفاده از ابزار لغت‌نامه در زبان برنامه نویسی پایتون که برنامه FPLO2WANNIER با آن نوشته شده است ایجاد و خوانده می‌شود.

# واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

## E

Entangled Energy Bands .. درهم‌تنیدگی نوارهای انرژی .. 26

## F

Finite Difference Method ,17 .. روش اختلاف محدود ..  
flowchart ,24 .. روندنما ..

## G

Gauge Invariant ,16 .. ناوردای پیمانه‌ای ..

## I

Isolated bands ,10 .. نوارهای منزوی ..  
Isosurface ,3 .. سطح کاهش یافته ..

## L

Linear Combination of Atomic Orbitals .. ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی .. 28

Linear-scaling ,5 .. مقیاس خطی ..

Local Density Of States ,57 .. چگالی حالات موضعی ..

## A

Allotrop ,34 .. دگرشکل ..

## B

Ballistic ,5 .. بالستیک ..

Band ,3 .. نوار ..

Bond ,14 .. پیوند ..

## C

Cohesive(Binding) Energy ,36 .. انرژی تشکیل ..

Collinear Approximation ,33 .. تقریب هم‌خط ..

Composited bands ,10 .. نوارهای مرکب ..

core ,29 .. مغزه ..

## D

Degeneracy ,10 .. تبه‌گنی ..

Density Functional Theory ,28 .. نظریه تابعی چگالی ..

Dictionary ,123 .. لغت‌نامه ..

Disentanglement ,26 .. واتنیدن، واتنیدگی ..



- Q**  
 Quantum Transport, 6 ..... تراپرد کوانتومی
- S**  
 Scalar Relativistic, 33 ..... نسبتی اسکالر  
 Smooth Gauge, 9 ..... پیمانان نرم  
 Spread, 10, 15 ..... گستردگی
- T**  
 Trilinear Interpolation, 121 ..... انتگرال‌گیری سه‌خطی
- U**  
 Ultrasofts Pseudopotentials ..... شبه‌پتانسیل‌های فراصوت  
 ,19
- W**  
 Well-Localized, 9 ..... کاملاً جایگزیده
- Local Spin Density ..... تقریب چگالی اسپینی موضعی  
 Approximation, 33
- Localization ..... تابعی جایگزیدگی، تابعی گستردگی  
 Functional, 14
- Localized Molecular ..... اوربیتال‌های مولکولی جایگزیده  
 Orbitals, 5
- M**  
 Manifold, 10 ..... بس‌شاخه، بس‌راهه  
 Maximum Localized ..... توابع وانیر بیشینه جایگزیده  
 Wannier Functions, 5, 8
- N**  
 Nonunique, 10 ..... نایکتایی
- O**  
 Orthonormal, 5 ..... راست‌هنجار
- P**  
 Postprocceing, 119 ..... محاسبات مقدماتی  
 Projecror-Augmented ..... توابع موج تصویر تقویت شده  
 Wave method, 19
- Projected Density Of States ..... چگالی حالات تصویر شده  
 ,57
- Projection, 13 ..... تصویر

# واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

Quantum Transport	ترابرد کوانتومی، ۶	الف
Linear Combination of Atomic Orbitals	ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی، ۲۸	ابریاخته، ۱۲
Projection	تصویر، ۱۳	انتگرال‌گیری سه‌خطی، ۱۲۱
Local Spin Density Approximation	تقریب چگالی اسپینی موضعی، ۳۳	انرژی تشکیل، ۳۶
Collinear Approximation	تقریب هم‌خط، ۳۳	اوربیتال‌های مولکولی جایگزیده، ۵
Projector-Augmented Wave method	توابع موج تصویر تقویت شده، ۱۹	ب
Maximum Localized Wannier Functions	توابع وانیر بیشینه جایگزیده، ۵، ۸	بالستیک، ۵
		بس‌شاخه، بس‌راهه، ۱۰
		پ
Projected Density Of States	چگالی حالات تصویر شده، ۵۷	پخش‌شدگی، ۱۵
Local Density Of States	چگالی حالات موضعی، ۵۷	پیمانان نرم، ۹
		پیوند، ۱۴
		ت
Entangled Energy Bands	درهم‌تنیدگی نوارهای انرژی، ۲۶	تابعی جایگزیدگی، تابعی گستردگی، ۱۴
Allotrop	دگرشکل، ۳۴	تبهگنی، ۱۰

ن	ر
Gauge Invariant ..... ناوردای پیمانهای، ۱۶	Orthonormal ..... راست هنجار، ۵
Nonunique ..... نایکتایی، ۱۰	Finite Defference Method .. روش اختلاف محدود، ۱۷
Steepest-Desent .... نزول در راستای تندترین شیب، ۲۲	flowchart ..... روندنما، ۲۴
Scalar Relativestic ..... نسبتی اسکالر، ۳۳	
Density Functional Theory .. نظریه تابعی چگالی، ۲۸	<b>س</b>
Band ..... نوار، ۳	Isosurface ..... سطح کاهش یافته، ۳
Composited bands ..... نوارهای مرکب، ۱۰	<b>ش</b>
Isolated bands ..... نوارهای منزوی، ۱۰	Ultrasofts ..... شبه پتانسیل‌های فراصوت، ۱۹
	Pseudopotentials
<b>و</b>	
Disentangelment ..... واتنیدن، واتنیدگی، ۲۶	<b>ک</b>
	Well-Localized ..... کاملاً جایگزیده، ۹
	<b>گ</b>
	Spread ..... گسترده‌گی، ۱۰
	<b>ل</b>
	Dictionary ..... لغت‌نامه، ۱۲۳
	<b>م</b>
	Postprocceing ..... محاسبات مقدماتی، ۱۱۹
	core ..... مغزه، ۲۹
	Linear-scaling ..... مقیاس خطی، ۵

# فهرست اختصارات

## A

AFM4, ..... Atomic Force Microscopy

## B

BL38, ..... Buckled

## D

DOS3, ..... Density Of States

## F

FPLO28, ..... Full Potential Local Orbital

## L

LSDA33, ..... Local Spin Density Approximation

## M

MLWFs5, ..... Maximum Localized Wannier Functions

MV19, ..... Marzari and Vanderbilt method

**P**

PL38..... Planar

# مراجع

- [1] N. Marzari, A. a. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, “Maximally localized Wannier functions: Theory and applications,” *Reviews of Modern Physics*, vol.84, pp.1419–1475, oct 2012. ISSN 0034-6861. doi:10.1103/RevModPhys.84.1419. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84.1419>. , 2, 5
- [2] L. E. Ramos, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. L. P. Castineira, A. L. Rosa, and J. R. Leite, “Structural, electronic, and effective-mass properties of silicon and zinc-blende group-III nitride semiconductor compounds,” *Physical Review B*, vol.63, p.165210, apr 2001. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.63.165210. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.165210>. , 3
- [3] Lorenzo Paulatto, “bloch wave,” URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Bloch\\_wave](https://en.wikipedia.org/wiki/Bloch_wave). , 4
- [4] N. Marzari, I. Souza, and D. Vanderbilt, “An introduction to maximally-localized Wannier functions,” *Psi-K newsletter*, pp.129–168, 2003. URL: [http://www.psi-k.org/newsletters/News\\_{\\_}57/Highlight\\_{\\_}57.pdf](http://www.psi-k.org/newsletters/News_{_}57/Highlight_{_}57.pdf)<http://www.wannier.org/papers/MSVpsik.pdf>. , 6
- [5] R. Martin. *electron structure*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. ISBN 0521782856. doi:10.1017/CBO9780511805769. URL: <http://ebooks.cambridge.org/ref/id/CBO9780511805769>. 1
- [6] G. Grosso and G. P. Parravicini. *Solid State Physics*. Elsevier, 2014. ISBN 9780123850300. doi:10.1016/B978-0-12-385030-0.00001-3. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780123850300000013>. 2
- [7] C. Kittel, “Introduction to Solid State Physics,” *American Journal of Physics*, vol.35, no.6, p.547, 1967. ISSN 00029505. doi:10.1119/1.1974177. URL: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/35/6/10.1119/1.1974177>. 3
- [8] F. J. Giessibl, “Atomic resolution of the silicon (111)-(7x7) surface by atomic force microscopy,” *Science (New York, N.Y.)*, vol.267, pp.68–71, jan 1995. ISSN 0036-8075. doi:10.1126/science.267.5194.68. URL: <http://www.sciencemag.org/content/267/5194/68.short>. 4
- [9] N. Marzari and D. Vanderbilt, “Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands,” *Physical Review B*, vol.56, pp.12847–12865, nov 1997. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.56.12847. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.12847>. 4, 27
- [10] F. J. Giessibl, “Subatomic Features on the Silicon (111)-(7x7) Surface Observed by Atomic Force Microscopy,” *Science*, vol.289, pp.422–425, jul 2000. ISSN 00368075. doi:10.1126/science.289.5478.422. URL: <http://www-inst.eecs.berkeley.edu/~ee230/sp08/giessiblSi7x7AFM2000.pdf><http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.289.5478.422>. 4
- [11] G. H. Wannier, “The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals,” *Physical Review*, vol.52, pp.191–197, aug 1937. ISSN 0031-899X. doi:10.1103/PhysRev.52.191. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.191>. 5

- [12] S. F. Boys, "Construction of Some Molecular Orbitals to Be Approximately Invariant for Changes from One Molecule to Another," *Reviews of Modern Physics*, vol.32, pp.296–299, apr 1960. ISSN 0034-6861. doi:10.1103/RevModPhys.32.296. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.32.296>. 5
- [13] R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, "Theory of polarization of crystalline solids," *Physical Review B*, vol.47, pp.1651–1654, jan 1993. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.47.1651. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.47.1651>. 5
- [14] N.Rezaei, *study of maximally localized wannier function at CrAs andCrAs/GaAs interface*. Ph.D. thesis, Isfahan University of Technology, 2009. 5
- [15] H. J. Xiang, Z. Li, W. Z. Liang, J. Yang, J. G. Hou, and Q. Zhu, "Linear scaling calculation of maximally localized Wannier functions with atomic basis set," *Journal of Chemical Physics*, vol.124, pp.3–6, jun 2006. ISSN 00219606. doi:10.1063/1.2207622. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/124/23/10.1063/1.2207622>. 5
- [16] E. Schwegler, G. Galli, F. Gygi, and R. Q. Hood, "Dissociation of Water under Pressure," *Physical Review Letters*, vol.87, p.265501, dec 2001. ISSN 0031-9007. doi:10.1103/PhysRevLett.87.265501. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.265501>. 5
- [17] I. Schnell, G. Czycholl, and R. C. Albers, "Hubbard-U calculations for Cu from first-principles Wannier functions," *Physical Review B*, vol.65, p.075103, jan 2001. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.65.075103. URL: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0109303http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.075103>. 5
- [18] A. Calzolari, N. Marzari, I. Souza, and M. Buongiorno Nardelli, "Ab initio transport properties of nanostructures from maximally localized Wannier functions," *Physical Review B*, vol.69, p.035108, jan 2004. ISSN 1098-0121. doi:10.1103/PhysRevB.69.035108. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.035108>. 5
- [19] I. Paul and G. Kotliar, "Thermal transport for many-body tight-binding models," *Physical Review B*, vol.67, p.115131, mar 2003. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.67.115131. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.67.115131>. 5
- [20] A. López-Bezanilla, F. Triozon, S. Latil, X. Blase, and S. Roche, "Effect of the chemical functionalization on charge transport in carbon nanotubes at the mesoscopic scale.," *Nano letters*, vol.9, pp.940–4, mar 2009. ISSN 1530-6984. doi:10.1021/nl802798q. URL: <http://dx.doi.org/10.1021/nl802798q>. 5
- [21] Y.-S. Lee, M. B. Nardelli, and N. Marzari, "Band Structure and Quantum Conductance of Nanostructures from Maximally Localized Wannier Functions: The Case of Functionalized Carbon Nanotubes," *Physical Review Letters*, vol.95, p.076804, aug 2005. ISSN 0031-9007. doi:10.1103/PhysRevLett.95.076804. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.076804>. 6
- [22] S. Kim and N. Marzari, "First-principles quantum transport with electron-vibration interactions: A maximally localized Wannier functions approach," *Physical Review B*, vol.87, p.245407, jun 2013. ISSN 1098-0121. doi:10.1103/PhysRevB.87.245407. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.245407>. 6
- [23] G. H. Wannier, "The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals," *Physical Review*, vol.52, pp.191–197, aug 1937. ISSN 0031-899X. doi:10.1103/PhysRev.52.191. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.191>. 7
- [24] F. T. Klaus Koepnik, Igor Chaplygin, Arthur Ernst, Helmut Eschrig, Claire Loison, Ulrike Nitzsche, Ingo Opahle, Alim Ormeci, Helge Rosner, Manuel Richter, "FPLO," URL: <http://www.fplo.de>. 9
- [25] K. Koepnik, "Full-potential nonorthogonal local-orbital minimum-basis band-structure scheme," jan 1999. doi:10.1103/PhysRevB.59.1743. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.1743>. 9, 13

- [26] H. Eschrig and I. Bergert, "An optimized LCAO version for band structure calculations application to copper," *Physica Status Solidi (b)*, vol.90, pp.621–628, dec 1978. ISSN 03701972. doi:10.1002/pssb.2220900221. URL: <http://dx.doi.org/10.1002/pssb.2220900221><http://doi.wiley.com/10.1002/pssb.2220900221>. 9, 15
- [27] I. S. Arash Mostofi, Jonathan Yates, Young-Su Lee, Giovanni Pizzi, Nicola Marzari and D. Vanderbilt., "WANNIER90," URL: <http://www.wannier.org/>. 9
- [28] J. Trinckauf, "An ARPES study of correlated electron materials on the verge of cooperative order," sep 2013. URL: [http://www.qucosa.de/recherche/frontdoor/?tx\\_slubopus4frontend%5Bid%5D=urn:nbn:de:bsz:14-qucosa-158906](http://www.qucosa.de/recherche/frontdoor/?tx_slubopus4frontend%5Bid%5D=urn:nbn:de:bsz:14-qucosa-158906). 9
- [29] J. H. Wilkinson, J. H. Wilkinson, and J. H. Wilkinson. *The algebraic eigenvalue problem*, vol.87. Clarendon Press Oxford, 1965. 12
- [30] H. Eschrig, K. Koepnik, and I. Chaplygin, "Density functional application to strongly correlated electron systems," *Journal of Solid State Chemistry*, vol.176, pp.482–495, dec 2003. ISSN 00224596. doi:10.1016/S0022-4596(03)00274-3. URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022459603002743>. 14, 15
- [31] K. Koepnik, B. Velický, R. Hayn, and H. Eschrig, "Self-consistent LCAO-CPA method for disordered alloys," *Physical Review B*, vol.55, pp.5717–5729, mar 1997. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.55.5717. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.5717>. 14, 15
- [32] I. Opahle, K. Koepnik, and H. Eschrig, "Full-potential band-structure calculation of iron pyrite," *Physical Review B*, vol.60, pp.14035–14041, nov 1999. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.60.14035. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.14035>. 14
- [33] Helmut Eschrig Manuel Richter and I. Opahle. "Relativistic Solid State Calculations" in *Relativistic Electronic Structure Theory - Part II:*, vol.14. 2004. ISBN 9780444513007. URL: <https://www.elsevier.com/books/relativistic-electronic-structure-theory/schwerdtfeger/978-0-444-51299-4>. 16
- [34] K. Koepnik, H. Eschrig, I. Opahle, U. Nitzsche, I. Chaplygin, and M. Richter, "full-potential local-orbital minimum-basis scheme fplo," *psi-k*, no.52. URL: [http://www.psi-k.org/newsletters/News\\_52/Highlight\\_52.pdf](http://www.psi-k.org/newsletters/News_52/Highlight_52.pdf). 16
- [۳۵] مصطفی واحدی، "درختان پوشای کمینه دورنگی مسطح،" مجله فارسی نمونه، جلد ۱، صفحات ۲۲–۳۰، آبان ۱۳۸۷. برنمود: <http://dx.doi.org/10.1103/PB.47.1651>. ۱۷
- [۳۶] محمود امین طوسی، ناصر مزینی، و محمود فتحی، "افزایش وضوح ناحیه ای،" در چهاردهمین کنفرانس ملی سالانه انجمن کامپیوتر ایران، (تهران، ایران)، صفحات ۱۰۱–۱۰۸، دانشگاه امیرکبیر، اسفند ۱۳۸۷. تارنما: [http://www.civilica.com/Paper-ACCSI14-ACCSI14\\_107.htm](http://www.civilica.com/Paper-ACCSI14-ACCSI14_107.htm). ۱۷
- [37] S. Ri and S. Ri, "Proof that the maximally localized Wannier functions are real," *arXiv preprint*, no.3, p.7, 2014. URL: <http://arxiv.org/abs/1407.6824>. 17
- [38] "Atomic orbital," URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Atomic\\_orbital](https://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital). 23
- [39] K. Koepnik, "Full Potential Local Orbital Minimum Basis Bandstructure Scheme," *Manual*, no.March, 2014. URL: <http://www.fplo.de/download/doc.pdf>. 25
- [40] Wannier90, "wannier90 : User Guide," *Manual*, no.October, 2013. URL: [http://www.wannier.org/doc/user\\_guide.pdf](http://www.wannier.org/doc/user_guide.pdf). 25
- [41] E. W. Weisstein, "Normal Distribution," URL: <http://mathworld.wolfram.com/NormalDistribution.html>. 27
- [42] "Trilinear interpolation - Wikipedia, the free encyclopedia," URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Trilinear\\_interpolation](https://en.wikipedia.org/wiki/Trilinear_interpolation). 27



# Developing an interface code between FPLO and WANNIER90 for calculating maximally localized wannier functions

Mersad Mostaghimi

m.mostaghimi@ph.iut.ac.ir.com

January 6, 2016

Department of Physics

Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran

University Code: IUT-77142

Degree: M.S.c

Language: Farsi

supervisor: Dr.S.J.Hashemifar

hashemifar@cc.iut.ac.ir.com

## Abstract

In this project, we calculate the maximally localized wannier functions of a carbon chain and silisine by using FPLO and WANNIER90 packages. First the Marzari and Vanderbilt algorithm for finding the maximally localized wannier functions and the WANNIER90 code which is based on this algorithm, is introduced. We also introduce the Full Potential Localized Orbital method implemented in the FPLO package. Then the structural and electronic properties of carbon chain and silisine are calculated. Next, we use the Python script language and the results obtained within FPLO to develop a program for calculating the overlap and initial guess matrix which are required for Wannier90. Finally, the maximally localized wannier functions of carbon chain and silisine are calculated. In this procedure, the hybrid density of state are also computed .

**Keywords:** *wannier, FPLO, full potential, local orbital, hybrid density of state, wannier90, maximally localized wannier*



Isfahan University of Technology  
Department of Physics

# Developing an interface code between FPLO and WANNIER90 for calculating maximally localized wannier functions

A Thesis

Submitted in partial fulfillment of the requirements  
for the degree of Master of Science

by

*Mersad Mostaghimi*

Evaluated and Approved by the Thesis Committee, on January 6, 2016

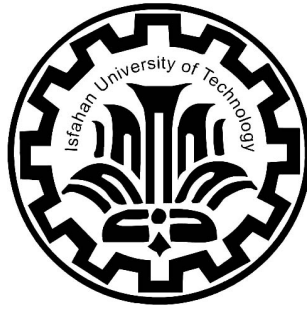
Supervisor: Dr. S. J. Hashemifar, Assoc. Prof sign

Advisor: Dr. M. Alaei, Assis. Prof sign

Examiner: Dr. N. Rezaei(Examiner) sign

Examiner: Dr. I. Abdolhoseini Sarsari, Assis. Prof(Examiner) sign

Department Graduate Coordinateor: Dr. F. Shahbazi sign



Isfahan University of Technology  
Department of Physics

DISSERTATION SUBMITTED IN PARTIAL  
FULFILLMENT OF THE REQUIREMENTS FOR THE  
DEGREE OF  
M.S.c

# Developing an interface code between FPLO and WANNIER90 for calculating maximally localized wannier functions

Supervisor

*Dr.Sayed Javad Hashemifar*

Advisor

*Dr.Mojtaba Alaei*

by

*Mersad Mostaghimi*

Isfahan

2015