بسم الله الرحمن الرحيم

تولید برنامه‌ی اتصال بسته‌های محاسباتی FPLO و WANNIER90 برای محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

مرصاد مستقیمی

استاد راهنما: دکتر سیّد جواد هاشمی‌فر

استاد مشاور: دکتر مجتبی اعلایی

گروه محاسبات کوانتومی مواد دانشکده‌ی فیزیک

دانشگاه صنعتی اصفهان

دی ماه ۱۳۹۴

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوّم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوّم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش سوّم: معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوّم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش سوّم: معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش چهارم: زنجیره‌ی کربن، سیلیسین

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوّم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش سوّم: معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش چهارم: زنجیره‌ی کربن، سیلیسین

بخش پنجم: برنامه‌ی FPLO2WANNIER، چالشهای کدنویسی و نتایج آن

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

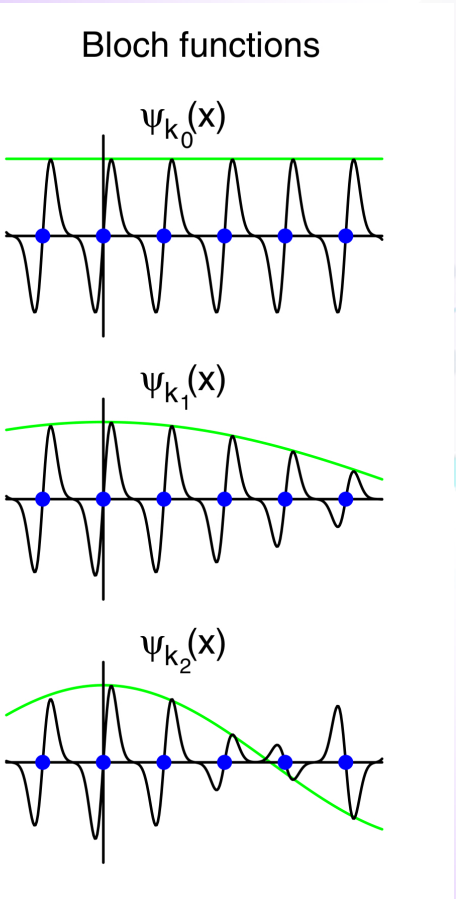
بخش دوم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش سوم: معرّفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش چهارم: زنجیره‌ی کوپل پیلیسن

بخش پنجم: برنامه‌ی FPLO2WANNIER، چالشهای کدنویسی و نتایج آن

توابع بلوخ

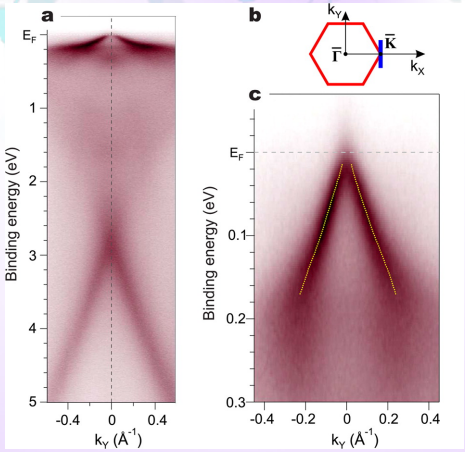


جواب معادله‌ی شرودینگر هستند

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

$$\psi_{n\mathbf{k}}(r) = u_{n\mathbf{k}}(r)\exp(i\mathbf{k}.r)$$

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



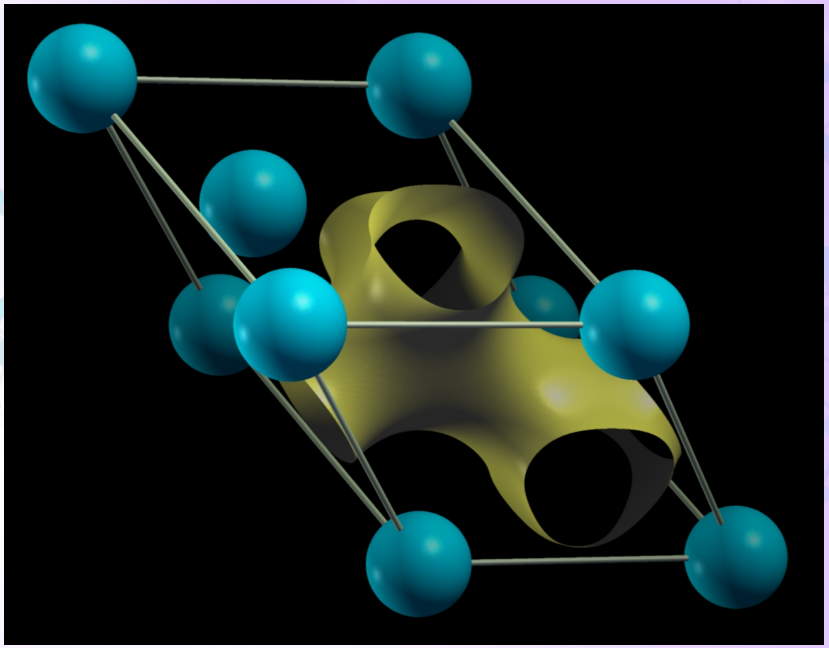
ابزاری مناسب برای توصیف در فضای فوریه

مناسب برای توصیف سطوح فرمی و نوارهای انرژی

درکل بلور گسترده‌اند[1]

[1] ؟

توصیفی شهودی ارائه نمی‌دهند



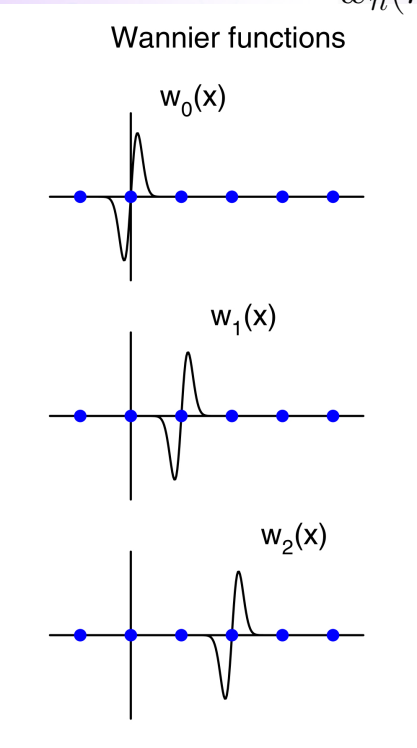
توصیف توابع بلوخ از بلور سیلیسیم

[1] تصویر از ویکی‌پدیا

توابع وانیر

تبدیل فوریه توابع بلوخ هستند

$$w_n(r-\mathbf{R}) = |\mathbf{R}n\rangle = \frac{V}{(۲\pi)^۳}\int_{BZ} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{R}} |\psi\rangle$$
$$= \frac{V}{(۲\pi)^۳}\int_{BZ} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{R}} u_{n\mathbf{k}}(r) e^{i\mathbf{k}.r}$$

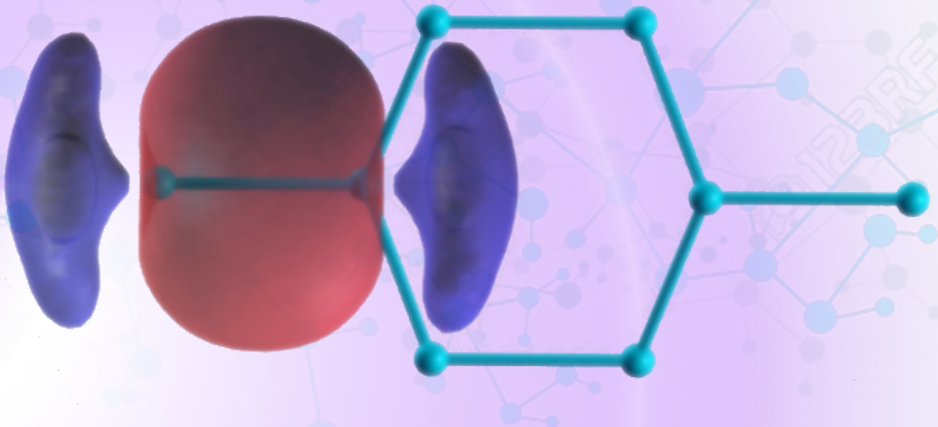


جواب معادله شرودینگر نیستند؛ امّا مجموعه‌ای راست هنجار تشکیل می‌دهند

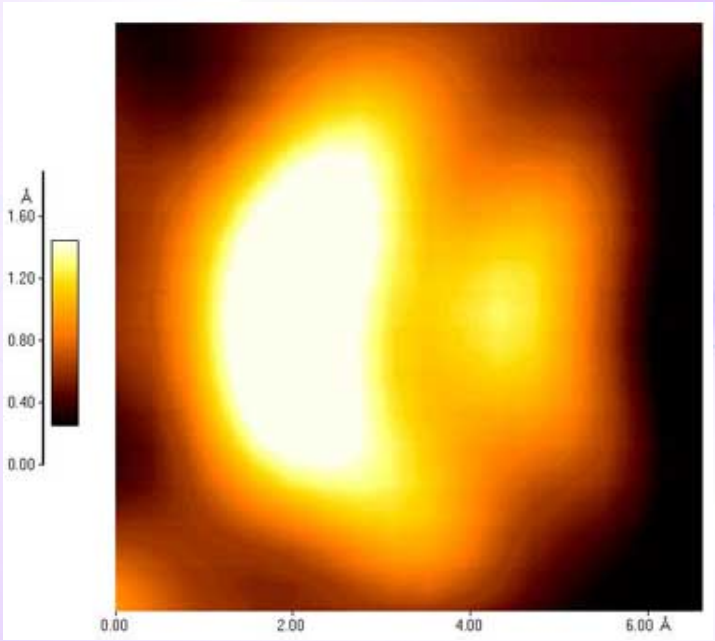
مهمترین ویژگی: توابع وانیر جایگزیده‌اند

تصویر شهودی توابع وانیر

تصویری شهودی از پیوندهای شیمیایی ارائه می کنند



حاصل از محاسبه توابع وانیر بیشینه جایگزیده؟



تصویر گرفته شده از بلور Si با میکرسکوپ AFM ؟

آزادی پیمانه‌ای

آزادی در انتخاب پیمانه‌ی توابع بلاخ،نایکتایی توابع وانیر را نتیجه می دهد

$$|\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\phi_n(\mathbf{k})}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\phi_n(\mathbf{k})}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$$

مسأله‌ی چند نواری و ماتریس چرخش

$$\left|\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\right\rangle = \sum_{m=1}^{J} U_{mn}^{(\mathbf{k})} \left|\psi_{m\mathbf{k}}\right\rangle$$

تابع وانیرتعمیم یافته برای مسأله چند نواری

$$w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathrm{BZ}} \left[\sum_m U_{mn}^{(\mathbf{k})} \psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right] e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}.\mathbf{R}}\, \mathrm{d}\mathbf{k}$$

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوّم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش سوّم: معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش چهارم: زنجیره‌ی کریل-پیلیسی

بخش پنجم: برنامه‌ی FPLO2WANNIER، چالشهای کدنویسی و نتایج آن

توابع وانیر بیشینه جایگزیده

روشMV ومعرفی تابعی گستردگی برای یافتن بهترین پیمانه

$$\Omega = \sum_n \left[\langle w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})|r^2|w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})\rangle - |\langle w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})|\mathbf{r}|w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})\rangle|^2\right] = \sum_n [\langle r^2\rangle_n - \bar{\mathbf{r}}_n^2]$$

تفکیک عبارات وابسته و مستقل از پیمانه

$$\Omega = \Omega_{\mathrm{I}} + \tilde{\Omega} = \Omega_{\mathrm{I}} + \Omega_{\mathrm{D}} + \Omega_{\mathrm{OD}}$$

$$\Omega_{\mathrm{I}} = \sum_n \left[\langle w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})|r^2|w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})\rangle - \sum_{\mathbf{R}m} |\langle w_{m\mathbf{R}}(\mathbf{r})|\mathbf{r}|w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})\rangle|^2\right]$$

$$\Omega_{\mathrm{D}} = \sum_n \sum_{\mathbf{R}\neq\mathbf{0}} |\langle w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r})|\mathbf{r}|w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})\rangle|^2$$

$$\Omega_{\mathrm{OD}} = \sum_{m\neq n} \sum_{\mathbf{R}} |\langle w_{m\mathbf{R}}(\mathbf{r})|\mathbf{r}|w_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})\rangle|^2$$

ماتریس همپوشانی

بخش‌های مختلف تابعی گستردگی نیزبه شکل زیر خواهد شد

$$\Omega_{\mathrm{I}} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{b}} \mathrm{w}_b \left(J - \sum_{mn} |M_{mn}^{(\mathbf{k},\mathbf{b})}|^2 \right)$$

$$\Omega_{\mathrm{OD}} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{b}} \mathrm{w} \sum_{m\neq n} |M_{mn}^{(\mathbf{k},\mathbf{b})}|^2$$

$$\Omega_D = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{b}} \mathrm{w} \sum_{n} (-\Im \ln M_{nn}^{(\mathbf{k},\mathbf{b})} - \mathbf{b}.\bar{\mathbf{r}}_n)^2$$

کمینه تابع گستردگی یعنی رسیدن به تابع وانیر بیشینه جایگزیده

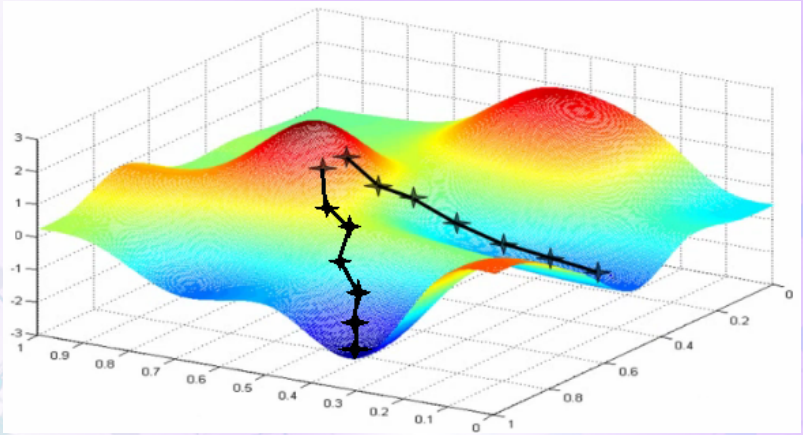
$$G^{(\mathbf{k})} = \frac{d\Omega}{dW^{(\mathbf{k})}} = f(M_{mn}^{(\mathbf{k})}) = 0$$

ماتریس همپوشانی حاصل از بخش دوره‌ای تابع موج، بازیگر اصلی در محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

$$M_{mn}^{(\mathbf{k},\mathbf{b})} = \langle u_{m\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}+\mathbf{b}} \rangle$$

ماتریس همپوشانی

روش نزول در راستای تندترین شیب



اعمال یک تغییر کوچک پادهرمیتی در ماتریس یکانی در هر گام و بررسی تغییرات گرادیان تابعی گستردگی

$$dW^{(\mathbf{k})} = \epsilon G^{(\mathbf{k})}$$

کمینه‌سازی در خلاف جهت گرادیان

$$|u_{n\mathbf{k}}\rangle \rightarrow |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \sum_m dW^{(\mathbf{k})}_{mn} |u_{m\mathbf{k}}\rangle$$

روش نزول در راستای تندترین شیب

ماتریس حدس اوّلیّه

شروع فرآیند کمینه‌سازی با یک تابع جایگزیده به عنوان حدس اوّلیّه

$$|\phi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_m |\psi_{m\mathbf{k}}\rangle\langle\psi_{m\mathbf{k}}|g_n\rangle$$

$$A_{mn}^{(\mathbf{k})} = \langle\psi_{m\mathbf{k}}|g_n\rangle$$

با اعمال یک تعامد تقارنی با استفاده از تبدیل لودین داریم:

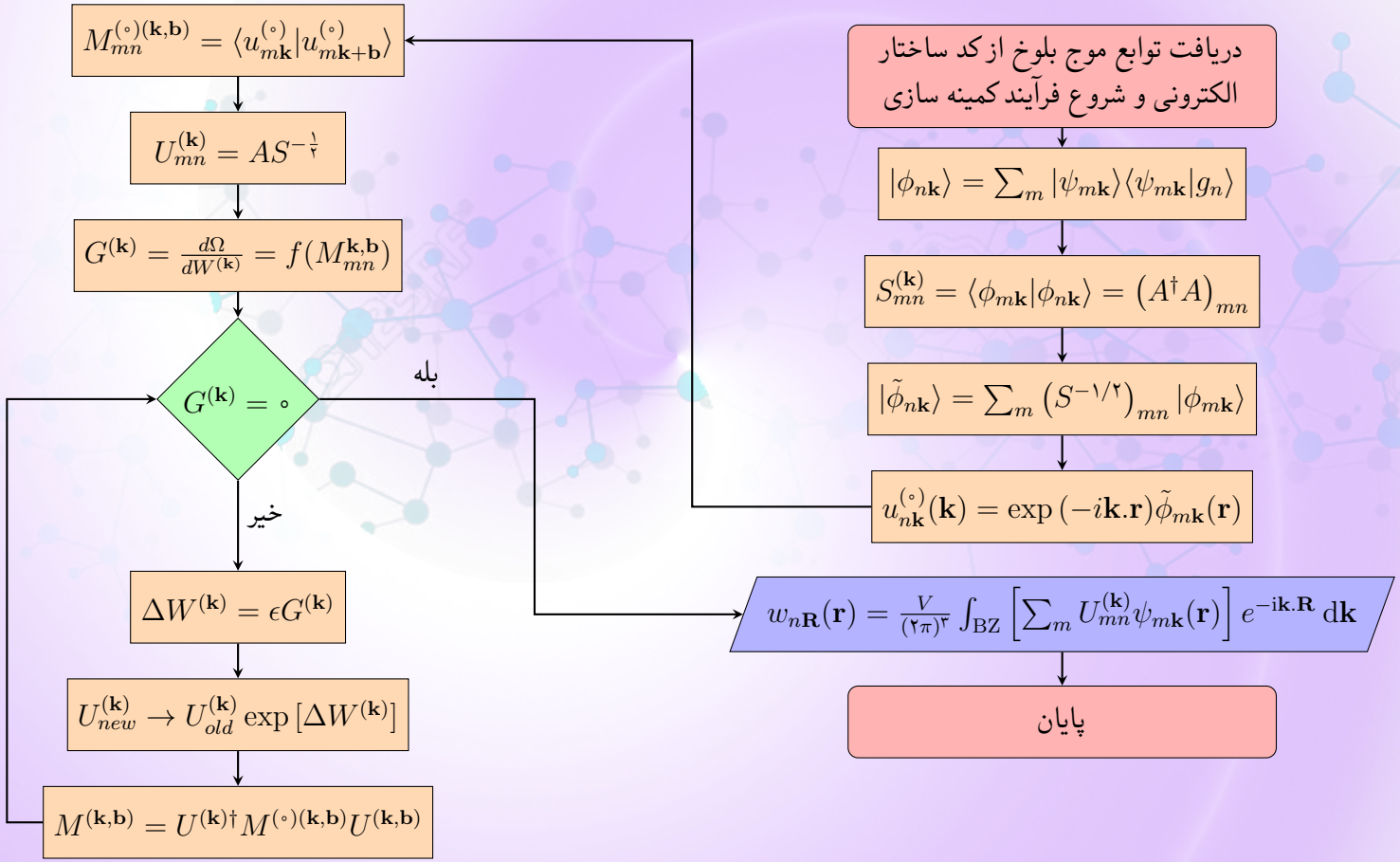
$$|\tilde{\phi}_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_m \left(S^{-1/2}\right)_{mn} |\phi_{m\mathbf{k}}\rangle$$

که در آن $S_{mn} = \langle\phi_{m\mathbf{k}}|\phi_{m\mathbf{k}}\rangle$ است.

می‌توان از $AS^{-1/2}$ به عنوان ماتریس تبدیل یکانی اوّلیّه در فرآیند کمینه‌سازی استفاده نمود:

$$|u_{n\mathbf{k}}^{(\circ)}(\mathbf{r})\rangle = \exp\left(-i\mathbf{k}.\mathbf{r}\right) \sum_m \left(AS^{-1/2}\right)_{mn} |u_{m\mathbf{k}}\rangle$$

روندنمای محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده



روندنمای محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

بخش سوّم: معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش چهارم: زنجیره‌ی کدین، فیلیس

بخش پنجم: برنامه‌ی FPLO2WANNIER، چالشهای کدنویسی و نتایج آن

معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

FPLO،رهیافت پتانسیل کامل با اربیتال‌های جایگزیده

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

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

معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش اوّل: معرّفی توابع بلوخ و وانیر

بخش دوم: معرّفی توابع وانیر بیشینه جایگزیده

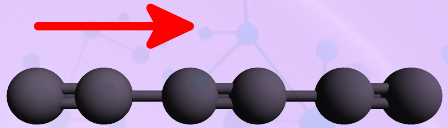
بخش سوم: معرّفی بسته‌ی محاسباتی FPLO

بخش چهارم: زنجیره‌ی کربن، سیلیسین

بخش پنجم: برنامه‌ی FPLO2WANNIER، چالشهای کدنویسی و نتایج آن

ماده‌ای سخت از کنارهم قرارگرفتن اتم‌های کربن

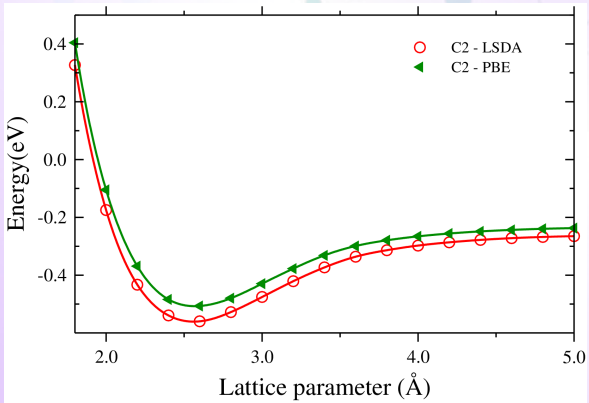
(ب)



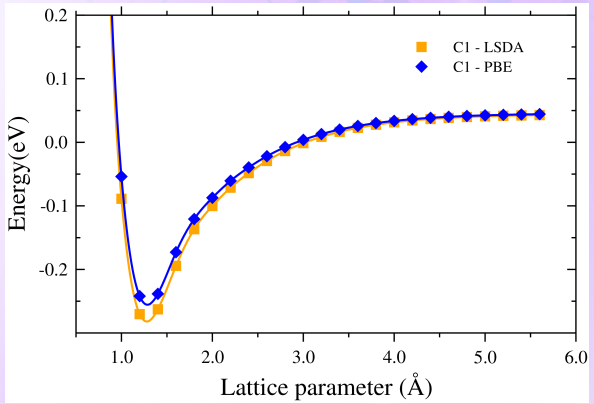
(آ)

زنجیره کربن با پیوندهای (الف)$C-C\equiv C$ و (ب)$C=C=C$. بردار رسم شده دوره‌ی تناوب زنجیره را نشان می‌دهد.

محاسبه فاصله‌ی تعادلی شبکه

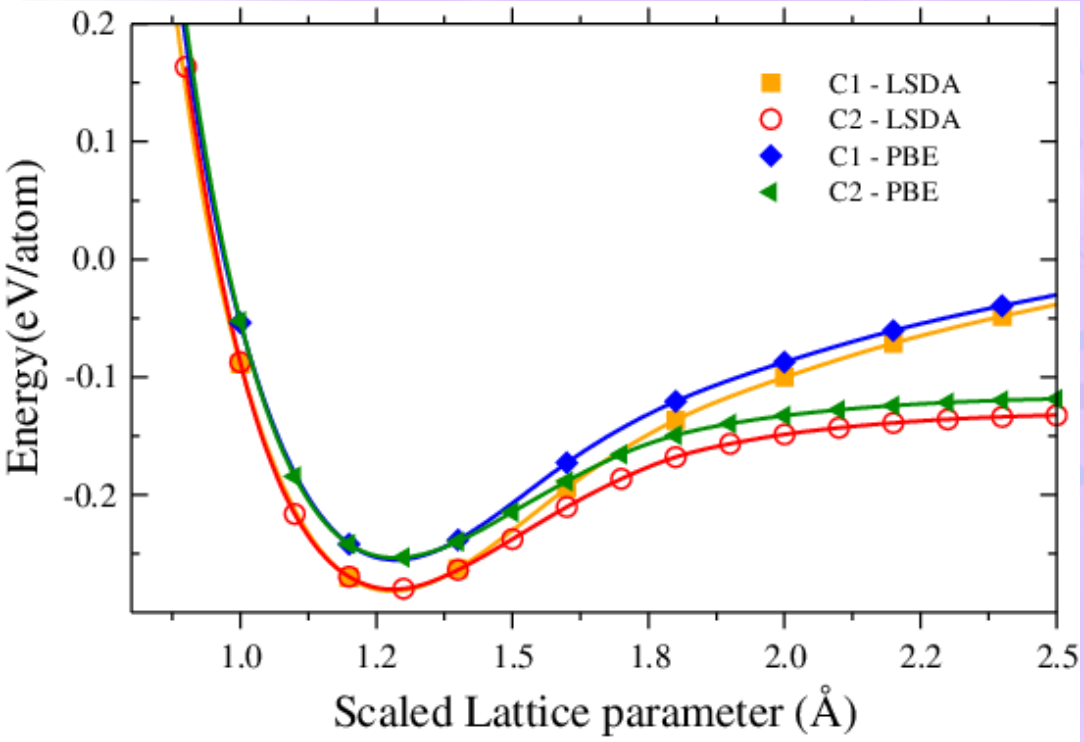


(ب) – ساختار برحسب دوره‌ی تناوب زنجیره C2

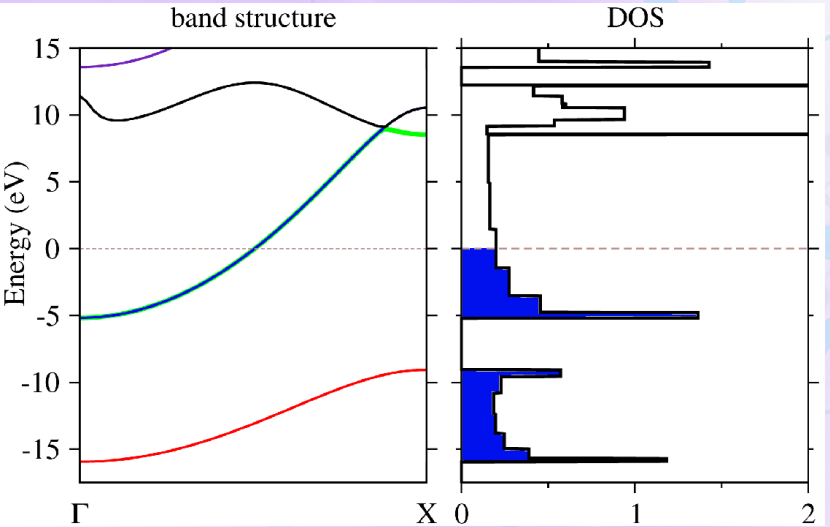


(آ) – ساختار برحسب دوره‌ی تناوب زنجیره C1

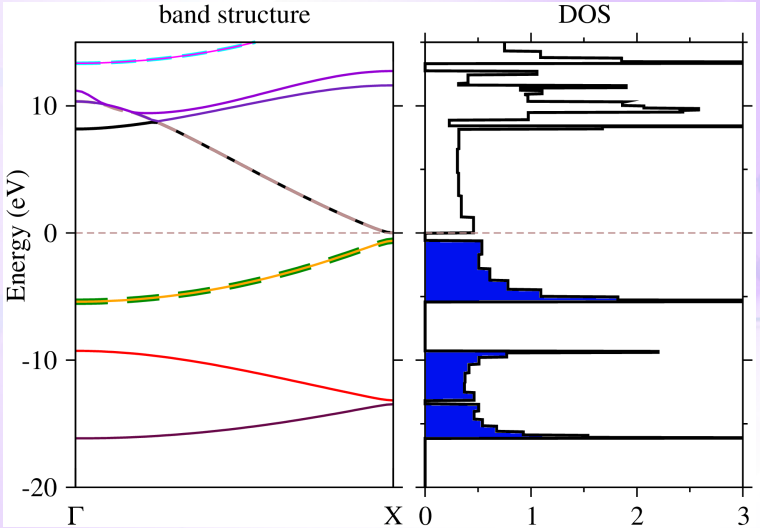
مقایسه‌ی انرژی تشکیل ساختارهای C1 و C2. پارامتر شبکه در C2 نصف شده است



چگالی حالات و ساختار نواری



(آ) – ساختار نواری و چگالی حالات در زنجیره‌ی C1



(ب) – ساختار نواری و چگالی حالات در زنجیره‌ی C2

انتخاب ما زنجیره‌ی C2

نمونه جدول

number	x	y	z	spread($\AA^2$)
1	1.159113	1.904272	0.274953	8.51143550
2	-1.076923	1.920266	0.252024	12.05672359
3	3.278325	1.932730	0.228643	8.46328652
total	3.360515	5.757268	0.755620	29.03144561

Ω	29.031445605	Ω_I	5.824953487
Ω_D	9.049224068	Ω_{OD}	14.157268051

یک جدول

جمع‌بندی

مورد یک

مورد دوّم

مراجع

فهرست مطالب

معرّفی توابع بلوخ و وانیر	۳
توابع بلوخ	۵
توابع وانیر	۶
آزادی پیمانه‌ای	۸
توابع وانیر بیشینه جایگزیده	۱۰
ماتریس همپوشانی	۱۲
نزول در راستای تندترین شیب	۱۴
ماتریس حدس اوّلیّه	۱۵
روندنمای محاسبه‌ی توابع وانیر بیشینه جایگزیده	۱۶
معرفی بسته‌ی محاسباتی FPLO	۱۸
زنجیره‌ی کربن، سیلیسین	۲۰
زنجیره‌ی کربن	۲۳

تشکر و قدردانی