

Quantum-Espresso

Hande Toffoli

Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü

April 5, 2010

İçerik

- 1 Giriş
- 2 Yoğunluk fonksiyoneli teorisi(DFT)
 - Dalga fonksiyonundan yoğunluğa
 - Kohn-Sham denklemleri
 - Çözüm
 - Teknik detaylar
- 3 Quantum-Espresso
 - Parametre dosyası (input)
 - Cards
 - Veri analizi
 - Örnekler

Giriş

<http://www.quantum-espresso.org/>

Quantum ESPRESSO is an integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials (both norm-conserving and ultrasoft).

- **ESPRESSO** = opEn Source Package for Research in Electronic Structure, Simulation, and Optimization
- GNU General Public License

Çok parçacıklı sistemlerde elektronik Hamiltonyen

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 \quad \text{kinetik enerji}$$
$$+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \text{e-e etkileşmesi}$$
$$+ \sum_i v_{\text{ext}}(\vec{r}_i) \quad \text{dış potansiyel}$$

Çok parçacıklı sistemlerde elektronik Hamiltonyen

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 \quad \text{kinetik enerji}$$
$$+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \text{e-e etkileşmesi}$$
$$+ \sum_i v_{\text{ext}}(\vec{r}_i) \quad \text{dış potansiyel}$$

- Dış potansiyel yerel (tek değişkene bağlı) olmalı.
- e-e etkileşmesinde *fazladan sayma* yapılmamalı.
- Değişkenler azaltılabilir mi?

Yoğunluğun tanımı

- Yoğunluk operatörü

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

Yoğunluğun tanımı

- Yoğunluk operatörü

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

- Yoğunluğun beklenen değeri

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{n}(\vec{r}) | \Psi \rangle &= \sum_i \int |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ &= N \int |\Psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N \\ &\equiv n(\vec{r})\end{aligned}$$

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

- Toplam enerji $n(\vec{r})$ cinsinden yazılabilir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

- Toplam enerji $n(\vec{r})$ cinsinden yazılabilir.
- Enerjinin minimumunu bulmak için fonksiyonel türev alınıp sifıra eşitlenir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

- Toplam enerji $n(\vec{r})$ cinsinden yazılabilir.
- Enerjinin minimumunu bulmak için fonksiyonel türev alınıp sifıra eşitlenir.
- Ortaya çıkan denklemlerden $n(\vec{r})$ çekilirse ve **taban seviyesi** yoğunluğunu ve enerjisini elde edebiliriz.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

- Toplam enerji $n(\vec{r})$ cinsinden yazılabilir.
- Enerjinin minimumunu bulmak için fonksiyonel türev alınıp sifıra eşitlenir.
- Ortaya çıkan denklemlerden $n(\vec{r})$ çekilirse ve **taban seviyesi** yoğunluğunu ve enerjisini elde edebiliriz.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi

- Toplam enerji $n(\vec{r})$ cinsinden yazılabilir.
- Enerjinin minimumunu bulmak için fonksiyonel türev alınıp sifıra eşitlenir.
- Ortaya çıkan denklemlerden $n(\vec{r})$ çekilirse ve **taban seviyesi** yoğunluğunu ve enerjisini elde edebiliriz.

$n(\vec{r})$ 'e varyasyonel yaklaşım : Kohn-Sham *ansatz*

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2$$

Enerjinin $n(\vec{r})$ cinsinden ifadesi

Kinetik enerji

$$T = T_s + \Delta T$$

$$T = -\frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \Psi^* \nabla_i^2 \Psi$$

$$T_s = -\frac{1}{2} \sum_i \int d\vec{r} \phi_i^*(\vec{r}) \nabla_i^2 \phi_i(\vec{r})$$

$$\Delta T = T_g - T_s$$

Gerçek K.E.

Tek parçacıklı K.E.

Fark (önemli!)

Enerjinin $n(\vec{r})$ cinsinden ifadesi

Dış potansiyel enerji — yaklaşımsız ifade

$$\begin{aligned} E_{\text{ext}} &= \sum_i \int d\vec{r}_i v_{\text{ext}}(\vec{r}_i) |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 \\ &= \int d\vec{r} v_{\text{ext}}(\vec{r}) n(\vec{r}) \end{aligned}$$

Enerjinin $n(\vec{r})$ cinsinden ifadesi

e-e etkileşmesi

$$E_{ee} = E_{cl} + \Delta E_{ee}$$

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \frac{|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Gerçek etkileşme

$$E_{cl} = \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Klasik etkileşme

$$\Delta E = E_{ee} - E_{cl}$$

Fark (Çok önemli!)

Enerjinin $n(\vec{r})$ cinsinden ifadesi

Toplam enerji

$$\begin{aligned} E_t = & -\frac{1}{2} \sum_i \int d\vec{r} \phi_i^*(\vec{r}) \nabla^2 \phi_i(\vec{r}) \\ & + \int d\vec{r} v_{\text{ext}}(\vec{r}) n(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ & + \underbrace{\Delta T + \Delta E_{ee}}_{E_{xc}} \end{aligned}$$

Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi

$$E_{xc} = \Delta E_{ee} + \Delta T$$

- E_{xc} , değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi.
- e-e etkileşmesindeki Pauli terimini ve korelasyonu içerir.
- E_{xc} enerjisini $n(\vec{r})$ cinsinden yazmanın tek yolu bu terime bir yaklaşım yapmaktır.

Değiş-tokuş ve korelasyona yerel yaklaşım

- **Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA):** Sistemin her noktasının küçük bir komşuluğunda homojen elektron gazı varmış gibi alınır.
- Homojen elektron gazı :
 - $\epsilon_x \rightarrow$ genellikle analitik olarak (Hartree-Fock, diyagramsal açılımlar)
 - $\epsilon_c \rightarrow$ nümerik yollardan (Monte Carlo) + çeşitli bilinen limitler arasında interpolasyon yaparak
 - $\epsilon_{xc} = \epsilon_x + \epsilon_c$

Değiş-tokuş ve korelasyona yerel yaklaşım

- **Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA):** Sistemin her noktasının küçük bir komşuluğunda homojen elektron gazı varmış gibi alınır.
- Homojen elektron gazı :
 - $\epsilon_x \rightarrow$ genellikle analitik olarak (Hartree-Fock, diyagramsal açılımlar)
 - $\epsilon_c \rightarrow$ nümerik yollardan (Monte Carlo) + çeşitli bilinen limitler arasında interpolasyon yaparak
 - $\epsilon_{xc} = \epsilon_x + \epsilon_c$

Sonuç

$$E_{xc}(\vec{r}) = \int d\vec{r} n(r) \epsilon_{xc}(n(\vec{r}))$$

Enerji fonksiyoneli

Fonksiyonel?

Fonksiyon : $x \rightarrow y = f(x)$

Fonksiyonel : $f(x) \rightarrow y = \mathcal{F}[f]$

$$E[n] = T_s[n] + \frac{1}{2} \int d\vec{r} n(\vec{r}) v_{\text{ext}}(\vec{r}) + \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int d\vec{r} n(\vec{r}) \epsilon_{\text{xc}}(\vec{r})$$

NOT 1: Enerji burada doğal birimler cinsinden yazılmıştır.

$(\hbar = m = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon} = e = 1)$

NOT 2: T_s direkt olarak $n(\vec{r})$ 'i içermese de $\phi_i(\vec{r})$ orbitalleri yoluyla n 'nin fonksiyoneliidir.

Fonksiyonel türev

- Taban seviyesindeki yoğunluk

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n} = 0$$

eşitliğini sağlayan $n(\vec{r})$ 'dir.

- $n(\vec{r})$ varyasyonel $\Rightarrow \phi_i$ orbitallerine göre türev

$$\frac{\delta E[n]}{\delta \phi_i^*} = 0$$

- **Koşul** : Minimizasyon sırasında orbitaller ortonormal kalmalıdır \Rightarrow Lagrange çarpanları

$$\frac{\delta}{\delta \phi_j^*} \left\{ E[n] - \sum_i \lambda_i \left[\int d\vec{r} |\phi_i(\vec{r})|^2 - 1 \right] \right\} = 0$$

Kohn-Sham denklemleri

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{ext}} + \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{\text{xc}} \right\} \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r})$$

Kohn-Sham denklemleri

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{ext}} + \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{\text{xc}} \right\} \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r})$$

Özellikler

- Lagrange çarpanları özenerjiler olarak geliyor.
- Bildiğimiz Schrödinger denklemi yapısında

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}} \right] \phi_j(\vec{r}) = \epsilon_j \phi_j(\vec{r})$$

- V_{eff} orbitallere bağlı \rightarrow *self-consistent* çözümler

Baz fonksiyonları

- KS denklem sistemini matris haline getirmek için

$$\phi_i(\vec{r}) = \sum_n c_{in} \chi_n(\vec{r})$$

- Bütün operatörler bu bazda yazılacak

$$T_{nm} = \langle \chi_n | \hat{T} | \chi_m \rangle$$

$$V_{nm} = \langle \chi_n | \hat{V}_{eff} | \chi_m \rangle$$

$$H_{nm} = T_{nm} + V_{nm}$$

- Matris ifadesinde

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{C} = \epsilon \mathbf{C}$$

- **Önemli** : Özdeğer vektörü \mathbf{C} 'nin her sütunu bir Kohn-Sham orbitalinin seçilen bazdaki ifadesidir (katsayılar şeklinde).

Algoritma

- 1 Gelişigüzel bir yoğunluk seç, toplam enerjiyi bul (E_1).

Algoritma

- 1 Gelişigüzel bir yoğunluk seç, toplam enerjiyi bul (E_1).
- 2 V_{eff} 'i hesapla, Kohn-Sham sistemini oluştur.

Algoritma

- 1 Gelişigüzel bir yoğunluk seç, toplam enerjiyi bul (E_1).
- 2 V_{eff} 'i hesapla, Kohn-Sham sistemini oluştur.
- 3 Matris algoritmaları kullanarak Kohn-Sham denklemlerini çöz.

Algoritma

- 1 Gelişigüzel bir yoğunluk seç, toplam enerjiyi bul (E_1).
- 2 V_{eff} 'i hesapla, Kohn-Sham sistemini oluştur.
- 3 Matris algoritmaları kullanarak Kohn-Sham denklemlerini çöz.
- 4 **C** matrisinin en küçük özdeğere sahip N sütununu al ve baz fonksiyonlarını kullanarak KS orbitallerini oluştur.

Algoritma

- 1 Gelişigüzel bir yoğunluk seç, toplam enerjiyi bul (E_1).
- 2 V_{eff} 'i hesapla, Kohn-Sham sistemini oluştur.
- 3 Matris algoritmaları kullanarak Kohn-Sham denklemlerini çöz.
- 4 **C** matrisinin en küçük özdeğere sahip N sütununu al ve baz fonksiyonlarını kullanarak KS orbitallerini oluştur.
- 5 Yeni yoğunluğu ve enerjiyi bul (E_2).

Algoritma

- 1 Gelişigüzel bir yoğunluk seç, toplam enerjiyi bul (E_1).
- 2 V_{eff} 'i hesapla, Kohn-Sham sistemini oluştur.
- 3 Matris algoritmaları kullanarak Kohn-Sham denklemlerini çöz.
- 4 **C** matrisinin en küçük özdeğere sahip N sütununu al ve baz fonksiyonlarını kullanarak KS orbitallerini oluştur.
- 5 Yeni yoğunluğu ve enerjiyi bul (E_2).
- 6 $\Delta E = E_2 - E_1$ yeteri kadar küçükse hesap tamamlanmıştır, değilse 2 numaraya dön.

Yoğunluk karıştırması (charge mixing)

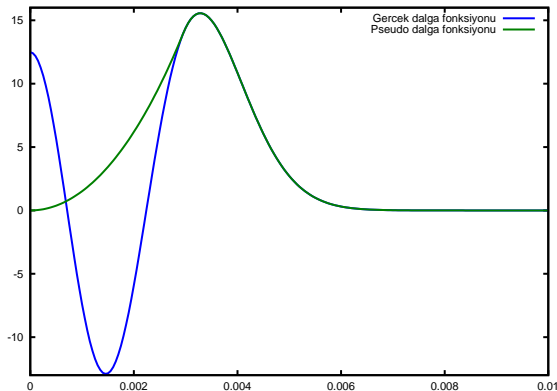
- Yoğunluktaki ani değişiklikleri önlemek için, her adımdaki yeni yoğunluk bir önceki adımdaki yoğunlukla belli bir oranda karıştırılır.

$$n_{yeni} = \alpha n_{yeni} + (1 - \alpha)n_{eski}$$

- α çok büyük \Rightarrow enerjide ani salınımlar
- α çok küçük \Rightarrow yavaş yakınsama

Pseudopotansiyel

- Coulomb potansiyeli yerine daha yavaş değişen (düzgün) bir potansiyel.
- Belli bir r_c yarıçapından sonra atomik orbitallerle aynı, öncesinde parametrik



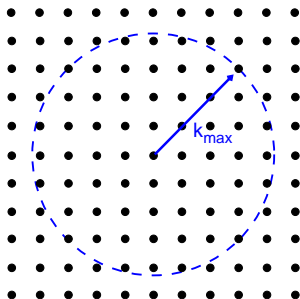
Pseudopotansiyel

- Orbitalleri bulduktan sonra pseudopotansiyeli bul.
- İki çeşit pseudopotansiyel mevcuttur.
 - *Norm conserving* : $r < r_c$ için norm korunur
 - *Ultrasoft* : $r < r_c$ için norm korunmaz, eksik yük yoğunluğu elle eklenir.

Düzlem dalga eşik enerjisi

- Kullanılan baz fonksiyonlarının sayısını belirler

$$\phi_i(\vec{k}) = \sum_{|\vec{k}| < k_{max}} C_{i\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$



$$E_{cut} = \frac{1}{2} k_{max}^2$$

k-uzayında integral

- Düzlem dalga bazı \Rightarrow Fourier dönüşümü
- İntegraller k-uzayında alınabilir

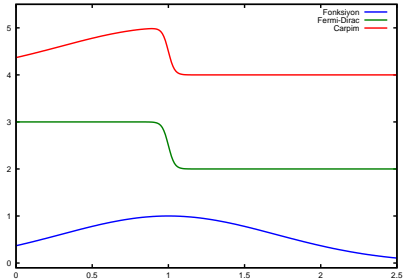
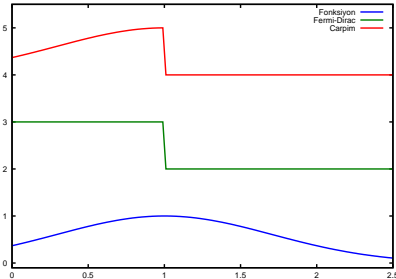
$$\langle f \rangle = \int f(\vec{k}) d\vec{k} \sim \frac{\Delta_{\vec{k}}}{N_{\vec{k}}} \sum_{\vec{k}} f(\vec{k})$$

- İntegraller toplamlara çevrilir.
- Ne kadar çok k-noktası kullanılırsa o kadar iyi bir yaklaşım elde edilir.

Metallerde integrasyon — *smearing*

- Metallerde Fermi-Dirac dağılımı kullanılır

$$\langle g \rangle = \int g(\vec{k}) f_{FD}(\vec{k}) d\vec{k}$$



Quantum ESPRESSO'nun içerdiği programlar

- Programlar
 - PWSCF : Plane-wave self-consistent field (düzlem dalga hesabı)
 - CP : Car-Parrinello moleküler dinamik
 - PHONON : Fonon hesapları
 - FPMD : Geleneksel moleküler dinamik
 - Wannier : Wannier fonksiyonları ile iletkenlik hesapları
 - GW : GW yaklaşımı
 - PLUMED : Metadinamik
- Konuşma PWSCF üzerine kurulu olacaktır. Diğer kodlarda da benzer input yapıları kullanılmaktadır.
- İzleyicilerin temel atomik fizik ve katıhal fiziği bildikleri varsayılacaktır.

QUANTUM-ESPRESSO'nun kapsamı

- Düzlem dalga enerji hesaplamaları
- Değiş-tokuş, korelasyon potansiyelleri
- *Pseudopotansiyel* oluşturma kodu
 - Norm-conserving, ultrasoft
 - Skalar relativistik, tam relativistik
- Geometrik optimizasyon
- Fonon hesapları (harmonik/anharmonik/e-fonon etkileşmesi)
- Elektrik alan
- Eşdüzlemsel olmayan manyetizma
- Infrared ve Raman kesit alanları
- Aktivasyon enerjileri
- Spektroskopi
- PAW (Plane augmented waves)

Genel yapı

- Parametre dosyası çeşitli bölümlere ayrılmıştır.

Namelistler

&CONTROL: hesap ile ilgili genel anahtar kelimeler

&SYSTEM: fiziksel sistemin genel özellikleri

&ELECTRONS: elektronik değişkenler

&IONS (seçmeli): ionik değişkenler

&CELL (seçmeli): simulasyon hücresi ile ilgili değişkenler

&PHONON (seçmeli): fonon hesabı ile ilgili değişkenler

Genel yapı

Zorunlu ve seçmeli CARD'lar

ATOMIC SPECIES

ATOMIC POSITIONS

K_POINTS

CELL PARAMETERS(optional)

OCCUPATIONS(optional)

FIRST_IMAGE(optional)

LAST_IMAGE(optional)

CLIMBING IMAGES(optional)

Tipik bir input — elmas Si

```
&control
  calculation = 'scf'
  restart_mode='from_scratch',
  pseudo_dir = '~/pseudo',
  outdir='tmp', /
&system
  ibrav = 2,
  celldm(1) = 11.0,
  nat = 2,
  ntyp = 1,
  ecutwfc = 20, /
&electrons /
ATOMIC_SPECIES
Si 1.0 Si.pbe-rrkj.UPF
ATOMIC_POSITIONS {alat}
Si 0 0 0
Si 0.25 0.25 0.25
K_POINTS {automatic}
6 6 6 0 0 0
```

&control

Genel anahtar kelimeler

- calculation :
 - scf : geometrik optimizasyonsuz hesap
 - nscf : tek nokta hesabı (bir önceki potansiyeli alır)
 - relax : geometrik optimizasyon
 - md : moleküler dinamik
 - vc-relax : simülasyon hücrelerini de içeren geometrik optimizasyon

&control

Genel anahtar kelimeler

- calculation :

scf : geometrik optimizasyonsuz hesap

nscf : tek nokta hesabı (bir önceki potansiyeli alır)

relax : geometrik optimizasyon

md : moleküler dinamik

vc-relax : simülasyon hücrelerini de içeren geometrik optimizasyon

- restart_mode :

from_scratch : $\{\psi_i(\vec{r})\}$ için ön tahminsiz hesap

restart : Daha önceki hesaptan alınan bilgi ile başla

Not 1 : PWSCF'in diske kaydettiği veriler $n(\vec{r})$, $V_{eff}(\vec{r})$ ve $\{\psi_i(\vec{r})\}$

Not 2 : Önceki hesabın uygun şekilde kesilmiş olması gerekiyor.

&control

Genel anahtar kelimeler

- calculation :

scf : geometrik optimizasyonsuz hesap

nscf : tek nokta hesabı (bir önceki potansiyeli alır)

relax : geometrik optimizasyon

md : moleküler dinamik

vc-relax : simülasyon hücrelerini de içeren geometrik optimizasyon

- restart_mode :

from_scratch : $\{\psi_i(\vec{r})\}$ için ön tahminsiz hesap

restart : Daha önceki hesaptan alınan bilgi ile başla

Not 1 : PWSCF'in diske kaydettiği veriler $n(\vec{r})$, $V_{eff}(\vec{r})$ ve $\{\psi_i(\vec{r})\}$

Not 2 : Önceki hesabın uygun şekilde kesilmiş olması gerekiyor.

- outdir : Geçici ara dosyaların kaydedildiği klasör

&control

Genel anahtar kelimeler

- calculation :

scf : geometrik optimizasyonsuz hesap

nscf : tek nokta hesabı (bir önceki potansiyeli alır)

relax : geometrik optimizasyon

md : moleküler dinamik

vc-relax : simülasyon hücresini de içeren geometrik optimizasyon

- restart_mode :

from_scratch : $\{\psi_i(\vec{r})\}$ için ön tahminsiz hesap

restart : Daha önceki hesaptan alınan bilgi ile başla

Not 1 : PWSCF'in diske kaydettiği veriler $n(\vec{r})$, $V_{eff}(\vec{r})$ ve $\{\psi_i(\vec{r})\}$

Not 2 : Önceki hesabın uygun şekilde kesilmiş olması gerekiyor.

- outdir : Geçici ara dosyaların kaydedildiği klasör

- pseudo_dir : Model potansiyellerin bulunduğu klasör

&system

Genel anahtar kelimeler

- nat : atom sayısı
- ntyp : atom çeşidi sayısı (Örn : $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$) için 4

&system

Genel anahtar kelimeler

- nat : atom sayısı
- ntyp : atom çeşidi sayısı (Örn : $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$) için 4
- nbnd : toplam enerji seviyesi sayısı (dolu ve boş)

&system

Genel anahtar kelimeler

- `nat` : atom sayısı
- `ntyp` : atom çeşidi sayısı (Örn : $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$) için 4
- `nbnd` : toplam enerji seviyesi sayısı (dolu ve boş)
- `ecutwfc` : kinetik enerji üst eşiği
- `ecutrho` : yoğunluk üst eşiği (USPP $\approx 10 \times$ `ecutwfc`)

&system

Örgü yapısı

- `ibrav` : Bravais örgüsü indisi — kristal oluşturmanın kolay yolu

&system

Örgü yapısı

- `ibrav` : Bravais örgüsü indisi — kristal oluşturmanın kolay yolu
- `celldm(1)-celldm(6)` : Bohr cinsinden örgü sabitleri

0 : user-specified

1 : simple cubic

2 : face-centered cubic

3 : body-centered cubic

4 : hexagonal

⋮

On dört kristal simetrisi

`celldm(1)` = seçilen uzunluk

`celldm(1)` = a

`celldm(1)` = a

`celldm(1)` = a

`celldm(1)` = a

`celldm(3)` = c/a

⋮

Uzunluk veya açı

&system

- `occupations` : Kohn-Sham orbitallerinin popülasyonu
 - '`smearing`' : Popülasyonun yavaş değişen bir fonksiyonla genişletilmesi
 - '`fixed`' : sabit popülasyon
 - '`from_input`' : popülasyonları bir dosyadan oku

&system

- `occupations` : Kohn-Sham orbitallerinin popülasyonu
 - '`smearing`' : Popülasyonun yavaş değişen bir fonksiyonla genişletilmesi
 - '`fixed`' : sabit popülasyon
 - '`from_input`' : popülasyonları bir dosyadan oku
- `smearing` : genişletme
 - '`gaussian`'
 - '`methfessel-paxton`'
 - '`marzari-vanderbilt`'
 - '`fermi-dirac`'

&system

- `occupations` : Kohn-Sham orbitallerinin popülasyonu
 - 'smearing' : Popülasyonun yavaş değişen bir fonksiyonla genişletilmesi
 - 'fixed' : sabit popülasyon
 - 'from_input' : popülasyonları bir dosyadan oku
- `smearing` : genişletme
 - 'gaussian'
 - 'methfessel-paxton'
 - 'marzari-vanderbilt'
 - 'fermi-dirac'
- `degauss` : genişlik
 - Küçük degauss \Rightarrow daha iyi sonuçlar
 - Large degauss \Rightarrow daha az k-noktası

The namelist &system

Manyetizma

- `nspin` : spin çeşidi
 - 1 : polarize olmamış
 - 2 : polarize

The namelist &system

Manyetizma

- `nspin` : spin çeşidi
 - 1 : polarize olmamış
 - 2 : polarize
- `starting_magnetization (i)` : simetrinin bozulası için

The namelist &system

Manyetizma

- `nspin` : spin çeşidi
 - 1 : polarize olmamış
 - 2 : polarize
- `starting_magnetization (i)` : simetrinin bozulası için
- `tot_magnetization` : Sabit ($n_{maj} - n_{min}$)

The namelist &system

Manyetizma

- `nspin` : spin çeşidi
 - 1 : polarize olmamış
 - 2 : polarize
- `starting_magnetization (i)` : simetrinin bozulası için
- `tot_magnetization` : Sabit ($n_{maj} - n_{min}$)
- `noncolin` : (.true./false.) Heisenberg stili spin

&electrons

Yük karışımı

- `mixing_mode` : yakınsamayı hızlandırır.
 - 'plain' : Broyden mixing
 - 'TF' : simple Thomas-Fermi screening (homojen sistemler)
 - 'local-TF' : local Thomas-Fermi screening (homojen olmayan sistemler)
- `mixing_beta` : $n_{i+1} = (1 - \beta)n_{i+1}^{KS} + \beta n_i$

&electrons

Yük karışımı

- `mixing_mode` : yakınsamayı hızlandırır.
 - 'plain' : Broyden mixing
 - 'TF' : simple Thomas-Fermi screening (homojen sistemler)
 - 'local-TF' : local Thomas-Fermi screening (homojen olmayan sistemler)
- `mixing_beta` : $n_{i+1} = (1 - \beta)n_{i+1}^{KS} + \beta n_i$

KS denklemlerinin çözümü

- `diagonalization` : Minimizasyon veya iteratif köşegenleştirme
 - `david` : Davidson iterative diagonalization
 - `cg` : Conjugate-gradients

&ions

Çekirdek dinamiği — md

- `ion_dynamics` :
 - `bfgs` : relax için
 - `damp` : relax ve vc-relax için
 - `verlet` : md için
- `ion_temperature` : MD için sıcaklık ayarı
 - `'rescaling'` : Belli aralıklarla hızları azalt
 - `'langevin'` : Langevin trmostatı
 - `'not_controlled'` : Sıcaklığın artmasına izin ver
- NEB anahtar kelimeleri : `opt_scheme`, `CI_scheme`, `k_min`,
`k_max`

Cards

Atomlarla ilgili anahtar kelimeler

- ATOMIC_SPECIES

```
[ sembol  kütle  pseudopotansiyel]
  B      10.811  B.pbe-n-van.UPF
  N      14.007  N.pbe-van_bm.UPF
  Mn     54.938  Mn.pbe-sp-van.UPF
```

Pseudopotansiyeller PWSCF kütüphanesinden alınabilir veya `ld.x` kodu kullanılarak oluşturulabilir.

Cards

Atomlarla ilgili anahtar kelimeler

- ATOMIC_SPECIES

```
[ sembol  kütle  pseudopotansiyel]
  B      10.811  B.pbe-n-van.UPF
  N      14.007  N.pbe-van_bm.UPF
  Mn     54.938  Mn.pbe-sp-van.UPF
```

Pseudopotansiyeller PWSCF kütüphanesinden alınabilir veya ld.x kodu kullanılarak oluşturulabilir.

- ATOMIC_POSITIONS {alat|bohr|crystal|angstrom}

```
[sembol  x      y      z      fix_x  fix_y  fix_z]
  N      0.00  0.00  0.00    0      1      1
  Mn     1.00  1.00  1.00
  B      2.25  2.25  2.25    1      0      1
```

Cards

Diğerleri

- K_POINTS { automatic }
[nkx nky nkz shiftx shifty shiftz]
6 6 6 0 1 0
- K_POINTS { tpiba | crystal | gamma }
[k_x k_y k_z wk]
0.25 0.25 0.25 0.333
0.75 0.25 0.00 0.666
- CELL_PARAMETERS
a(1,1) a(2,1) a(3,1)
a(1,2) a(2,2) a(3,2)
a(1,3) a(2,3) a(3,3)

Eğer cellldm(1)=0 Bohr, diğer durumlarda alat

Hesap sonrası analiz

- $\psi_i(\vec{r})$, $V_{eff}(\vec{r})$ ve ϵ_i verileri alınarak birçok grafik çizilebilir

```
&inputpp
```

```
/
```

```
&plot
```

```
  nfile = 3
```

```
  filepp(1) = "Rh100+C60.charge"
```

```
  filepp(2) = "C60.charge"
```

```
  filepp(3) = "Rh100.charge"
```

```
  weight(1) = 1.0
```

```
  weight(2) = -1.0
```

```
  weight(3) = -1.0
```

```
  iflag = 3
```

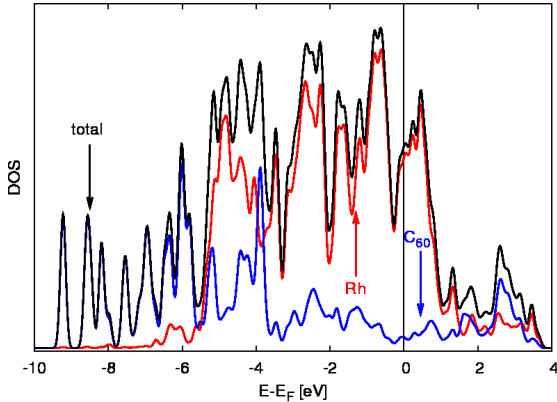
```
  output_format = 5
```

```
/
```

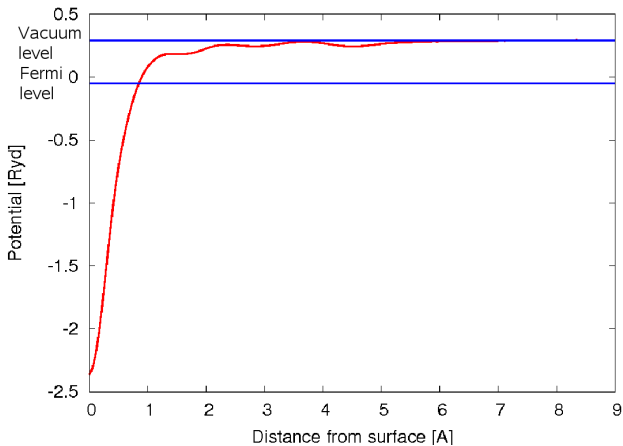
Analiz rutinleri nelerdir?

- DOS, PDOS, LDOS, ILDOS
- Yük yoğunluğu
- STM resimleri
- Toplam potansiyel, averaj potansiyel
- Band yapısı
- $|\psi_i(\vec{r})|^2$

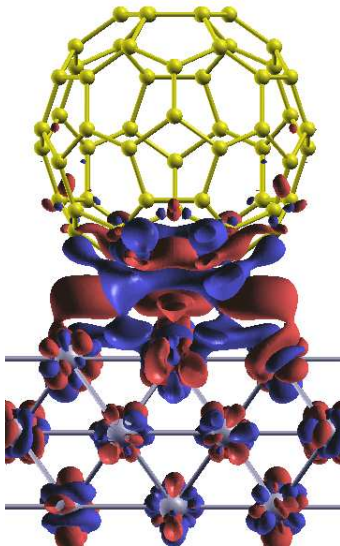
Toplam ve kısmi durum yoğunluğu



Ortalama potansiyel



Eş yoğunluk yüzeyleri



Kontur

