



سایت تخصصی الکترونیک، نور و نیمه هادی

# آشنایی با نرم افزار Quantum espresso

محمد مهدی خاتمی

بهار ۱۳۹۷

## فهرست

۱	نرم افزار کوانتوم اسپرسو	۱
۱-۱	مقدمه	۱
۲-۱	مراحل نصب کوانتوم اسپرسو در لینوکس	۱
۳-۱	اجرای نرم افزار QE	۳
۴-۱	برنامه PWscf	۴
۵-۱	رسم نمودار انرژی	۱۱
۶-۱	برنامه فونون	۱۳
۷-۱	رسم نمودار پاشندگی فونونی	۱۵
۸-۱	برهم کنش الکترون-فونون بوسیله نرم افزار EPW	۱۶
۲	نمایش شماتیک ماده بوسیله نرم افزار xcrysdn	۱۸
۳	نرم افزار gnuplot	۲۰

<u>۲</u>	شکل ۱ به روز رسانی اطلاعات نرم افزارهای نصب شده در محیط ترمینال
<u>۳</u>	شکل ۲ فایل متنی environment_variables
<u>۱۲</u>	شکل ۳ عکس تولید شده بوسیله برنامه plotband.x
<u>۱۵</u>	شکل ۴ نمودار پاشندگی فونونی رسم شده بوسیله plotband.x
<u>۱۷</u>	شکل ۵ تولید شبکه بردار موج برای استفاده در محاسبات nscf
<u>۱۹</u>	شکل ۶ محیط برنامه xcrysden
<u>۱۹</u>	شکل ۷ فراخوانی فایل مورد نظر برای رسم در xcrysden
<u>۲۰</u>	شکل ۸ اجرای نرم افزار gnuplot
<u>۲۲</u>	شکل ۹ محیط اجرای دستورات gnuplot
<u>۲۲</u>	شکل ۱۰ تصویر نمودار پاشندگی فونونی رسم شده بوسیله gnuplot