



سایت تخصصی الکترونیک، نور و نیمه هادی

آشنایی با نرم افزار Quantum espresso

(ویراست دوم)

محمد مهدی خاتمی

زمستان ۱۳۹۸

فهرست

فصل ۱	مقدمه	۱
۱-۱	مراحل نصب کوانتوم اسپرسو در لینوکس	۲
۲-۱	اجرای مثال های QE	۳
۳-۱	اجرای نرم افزار QE	۴
فصل ۲	برنامه PWscf	۶
۱-۲	برنامه ورودی pw.x	۶
۱-۱-۲	بلوک کنترل	۶
۲-۱-۲	بلوک سیستم	۸
۳-۱-۲	بلوک الکترون	۱۱
۴-۱-۲	متغیرهای دیگر	۱۱
۲-۲	خروجی های برنامه PWscf	۱۴
۱-۲-۲	رسم نمودار انرژی	۱۵
۲-۲-۲	چگالی حالات	۱۷
۳-۲-۲	چگالی حالات تصویر شده	۲۰
۳-۲	نکات QE	۲۱
فصل ۳	برنامه فونون	۲۲
۱-۳	برنامه ورودی ph.x	۲۲
۲-۳	خروجی های برنامه ph.x	۲۵
۱-۲-۳	رسم نمودار پاشندگی فونونی	۲۵
۲-۲-۳	بردارهای قطبش فونونی	۲۷
۳-۲-۳	رسم ساختاری بردارهای قطبش فونونی	۲۸
۴-۲-۳	چگالی حالات تصویر شده فونونی	۳۰
۳-۳	نکات	۳۰
فصل ۴	محاسبات الکترون-فونون بوسیله EPW	۳۲
۱-۴	مراحل انجام کار بوسیله EPW	۳۲
۲-۴	پارامترهای مهم برنامه ورودی EPW	۳۳

۳۸.....	نکات ۳-۴
۴۰.....	فصل ۵ پروژه ها
۴۰.....	پروژه ۱: نمودار انرژی Si بالک
۴۳.....	پروژه ۲: چگالی حالات در Si بالک
۴۴.....	پروژه ۳: نمودار پاشندگی فونونی در Silicane
۴۷.....	پروژه ۴: چگالی حالات تصویر شده فونونی Silicane
۴۸.....	پروژه ۵: نرخ پراکندگی Si بالک
۵۲.....	پیوست ۱ نرم افزار xcrysdn
۵۶.....	پیوست ۲ نرم افزار gnuplot
۶۱.....	مراجع

فهرست اشکال

صفحه

- شکل ۱ به روز رسانی اطلاعات نرم افزارهای نصب شده در محیط ترمینال ۲
- شکل ۲ فایل متنی environment_variables ۴
- شکل ۳ عکس تولید شده بوسیله برنامه plotband.x ۱۷
- شکل ۴ چگالی حالات رسم شده بوسیله gnuplot ۱۹
- شکل ۵ نمودار پاشندگی فونونی رسم شده بوسیله plotband.x ۲۷
- شکل ۶ نمونه رسم ساختاری بردارهای قطبش فونونی برای یک ساختار ۲۹
- شکل ۷ الف) فضای وارون ساختار FCC ب) برش صفحه حاوی نقاط پرتقارن FCC ۴۱
- شکل ۸ نمودار نوار انرژی Si بالک در راستای نقاط پرتقارن فضای وارون ۴۳
- شکل ۹ چگالی حالات Si بالک ۴۴
- شکل ۱۰ ساختار سیلیکین به صورت نما از بالا (a) و نما از بغل (b). فضای وارون سیلیکین شامل نقاط پرتقارن و بردارهای فضای وارون [۱۲] ۴۵
- شکل ۱۱ نمودار پاشندگی فونونی سیلیکین [۱۲] ۴۷
- شکل ۱۲ چگالی حالات تصویر شده فونونی در سیلیکین ۴۸
- شکل ۱۳ الف) نرخ پراکندگی فونونی در Si بالک برای تمام نوار انرژی ب) مقایسه ای از نرخ پراکندگی الکترونیهای نوار هدایت در سه نوع مختلف شبیه سازی [۱۳]. در نمودار ب، انرژی صفر بیانگر شروع نوار هدایت است و برای وضوح بیشتر مقایسه، از نقاط موجود نمونه برداری وزنی شده است. ۵۱
- شکل ۱۴ فراخوانی فایل مورد نظر برای رسم در xcrysden ۵۳
- شکل ۱۵ نمایش سطح کاهش یافته چگالی بار در xcrysden ۵۵
- شکل ۱۶ محیط اجرای دستورات gnuplot ۵۶
- شکل ۱۷ تصویر نمودار پاشندگی فونونی رسم شده بوسیله gnuplot ۵۷