

# WIEN2K: příprava výpočtu `init_lapw`

Jan Kuriplach, Vojtěch Chlan

Katedra fyziky nízkých teplot MFF UK

LS 2025

- 1 Struktura a jak ji získat
- 2 Inicializace výpočtu WIEN2k

- 1 Struktura a jak ji získat
- 2 Inicializace výpočtu WIEN2k

- Struktura v **case.struct** je klíčovou informací pro simulaci (a *de facto* jediným fyzikálním vstupem)
- Ostatní parametry jsou spíše technického charakteru ("metoda")
- Strukturu definují parametry základní buňky:
  - mřížové parametry ( $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ),
  - prostorová grupa symetrií,
  - polohy neekvivalentních atomů a jejich typ,
  - počáteční elektronová a spinová struktura
- Velmi často je struktura zároveň součástí výstupu (optimalizace/upřesnění struktury během výpočtu)

# Jak získat strukturu case.struct?

**case.struct** lze vytvořit několika způsoby:

- Přímo, např. editací šablony  
`$WIENROOT/SRC_templates/case.struct`  
(vhodné jen pro jednoduché struktury - **case.struct** je formátovaný)
- Konverzí z CIF (crystallographic information file):  
`cif2struct case.struct`
- Z parametrů základní buňky pomocí:  
`makestruct_lapw` (interaktivní skript)  
`structgen` ve webovém rozhraní `w2web`
- Úpravou jiné struktury (za pomoci nástrojů WIEN2k):  
nahrazení atomu jiným, snížení symetrie, změna buňky (`supercell`), ...

- VESTA (Visualization for Electronic and STructural Analysis)  
<https://jp-minerals.org/vesta/en>
  - Vizualizace struktury a velké množství užitečných funkcí
- Bilbao Crystallographic Server  
<https://www.cryst.ehu.es>
  - Tabulky grup symetrií, mnoho dalších strukturních informací a nástrojů (např. konverze formátů)
- Crystallography Open Database  
<https://www.crystallography.net/cod>
  - Open-access databáze krystalových struktur (CIFy ke stažení)

- 1 Struktura a jak ji získat
- 2 Inicializace výpočtu WIEN2k

Inicializace výpočtu ve WIEN2k má tři hlavní úkoly:

- 1 Detailní kontrola/korekce vstupního strukturního souboru **case.struct**  
- programy `nn`, `setrmt`, `sgroup`, `symmetry`
  - 2 Vytvoření vstupních souborů s výpočetními parametry  
- programy `symmetry`, `instgen`, `lstart`, `kgen`
  - 3 Spočítání startovní elektronové hustoty  $\rho_0$   
- programy `lstart`, `dstart`
- Všechny tři úkoly lze provést interaktivním skriptem `init_lapw`



Struktura v case.struct po konverzi nebo ručním vytvoření často nemá (správnou) prostorovou grupu symetrií, poloměry atomových koulí (RMT), nebo další parametry.

init\_lapw nejprve nastaví RMT a ověří, že se at. koule nepřekrývají.

- program **setrmt** nalezne největší možné RMT a umožní nastavit jejich % snížení (pro předpokládané úpravy struktury později během výpočtu). Zaručí, že RMT různých prvků budou v rozumných vzájemných proporcích a že všechny atomy daného prvku budou mít stejný RMT.
- program **nn** zkontroluje, zda se některé atomové koule nedotýkají. Také projde okolí každého atomu a zjistí, zda jsou všechny ekvivalentní atomy skutečně ekvivalentní. Navrhne případnou novou strukturu se správnými počty ekvivalentních atomů (jen v rámci stávající grupy). Vstupem je násobek vzdálenosti k nejbližšímu sousednímu atomu - do této vzdálenosti vypíše info o sousedních atomech. (default=2)

init\_lapw potom strukturu zkontroluje symetrii programem **sgroup**:

- **sgroup** nalezne prostorovou grupu struktury a ověří, zda všechny atomy (a jejich ekvivalence) této symetrii odpovídají.
- Pokud nalezne problém, navrhne novou strukturu se správnými počty ekvivalentních atomů a správnou grupou.  
(Toto je nedocenitelná funkce pro ruční úpravy struktury.)
- **sgroup** umí nalézt menší primitivní buňku. (např. hexa → rhombo)
- Existuje-li pro danou grupu více možností ("settings"), **sgroup** nastaví tu, kterou WIEN2k podporuje.

pozn.: Ne vždy je navržené změna fyzikálně relevantní a pro uživatele žádoucí (např. pouhý posun počátku, inverze některé z os, změna pořadí atomů). Změny lze **odmítnout**, a pokud později takové struktura úspěšně projde kontrolou programem **symmetry**, je to v pořádku.

init\_lapw dále spouští program **symmetry**:

- **symmetry** znovu ověří, zda struktura sedí se svou prostorovou grupou
- nalezne bodovou grupu každého atomu a navrhne nejvhodnější orientaci lokálního (kartézského) atomového systému
  - a tuto LOCAL MATRIX nastaví do case.structObecně vždy chceme co nejvíce využívat symetrii:  
tento proces sníží počet potřebných  $Y_{lm}$  funkcí pro bázi uvnitř RMT.
- Je vhodné ověřit v case.outputs, že bodové grupy jednotlivých atomů odpovídají tomu, co v naší struktuře očekáváme (např. srovnáním s informacemi na Bilbao serveru). Může to být také užitečná informace (např. pro NMR spektroskopii).

pozn.: Část výstupu **symmetry** už se vlastně týká tvorby báze, tj. "technických" vstupních parametrů, které již nesouvisí se strukturou.

Pro každý atom se spočítá počáteční hustota pomocí **Istart**:

- **instgen** vytvoří vhodnou počáteční elektronovou konfiguraci, vč. spinu
- zadáváme volbu výměnně-korelačního (X-C) potenciálu (LDA, GGA-PBE, ...)
- zadáváme energetické rozhraní core a valenčních stavů (typicky -6 Ry) (Chceme mít core stavy zcela uzavřeny v RMT, zbytek je valenční. )
- Počáteční konfigurace atomů je důležitá - při nesprávném nastavení obvykle výpočet nenaleze správný základní stav. (Např. při inicializaci magnetické látky jako nemagnetické tato zůstane ve výpočtu nemagnetická.)

# Vytvoření vstupních souborů s výpočetními parametry .in?

Jsou vytvořeny vstupní soubory case.in? (in0, in1, in2, inc),  
nejdůležitějšími parametry v nich jsou:

- **case.in0**: volba X-C potenciálu & definuje síť (IFFT), na které se potenciál bude počítat
- **case.in1**: limity báze - zásadní je  $RK_{\max} = \text{Min}(\text{RMT}) \cdot K_{\max}$ , který významně ovlivňuje přesnost a náročnost výpočtu
- **case.in2**:  $G_{\max}$  limituje rozvoj (hustoty a potenciálu) mimo RMT
- **case.inc**: konfigurace core elektronů

Obvykle je potřeba nastavit pouze  $RK_{\max}$  v **case.in1**. (ostatní default)

zadááme celkový počet k-bodů v Brillouinově zóně (BZ) uvážením symetrií se dedukuje počet v iBZ (ireducibilní části BZ) kolik bodů použít?  
Obecné rady:

- 1 malá základní buňka = velká reciproká BZ = více k-bodů
- 2 kovy = mnoho k-bodů (tisíce) oproti pár desítkám pro izolátory
- 3 některé výpočty chtějí mnoho k-bodů (např. hustota stavů DOS)
- 4 nejlepší je k-mesh konvergovat vůči nějaké sledované fyzikální veličině

Někdy struktura umožní (a je to vhodné) vysunout střed k-meshe mimo  $\Gamma$ .  
(Skript `init_lapw` to sám nabídne.)

- **dstart** vytvoří počáteční krystalovou hustotu jako superpozici počátečních atomových hustot (již vyrobené **lstartem**)
- Tato hustota (case.clmsum) už má bázi definovanou parametry v souborech case.in\*
- Pro spinově polarizovaný výpočet (magnetismus) je generována hustota UP a DN zvlášť

Tímto je inicializace výpočtu dokončena. Vše podstatné je připraveno pro běh iterativního cyklu SCF. Struktura (case.struct), hustota (case.clm\*), a vstupní soubory (case.in\*) tvoří kompaktní informaci, ze které je možné výpočet začít (např. z dříve uloženého běhu).