

WIEN2K: spuštění výpočtu a analýza výsledků

`init_lapw`

Jan Kuriplach, Vojtěch Chlan

Katedra fyziky nízkých teplot MFF UK

LS 2025

Základní schéma jedné iterace SCF:

- **LAPW0** výpočet potenciálů z elektronové hustoty
- **LAPW1** eigenproblem - nalezení vlastních čísel (E) a funkcí (ψ)
- **LAPW2** výpočet hustot valenčních elektronů
- **CORE** výpočet core elektronů
- **MIXER** smíchání nově spočtené hustoty se starou

Každý program zapíše stručný výstup do souboru **case.scf**.

run_lapw může mít mnohá nastavení, z nichž nejdůležitější jsou:

- konvergenční kritéria: -ec LIMIT -cc LIMIT -fc LIMIT
(energie, náboj v RMT koulích, atomové síly)
- maximální počet iterací: -i NUMBER
- inicializace nebo pokračování výpočtu: -l / -nl
- paralelizace přes k-body (podle .machines): -p
- zapnutí spin-orbitální vazby (podle case.inso): -so
- minimalizace atomových sil: -min

Další info pomocí run_lapw -h

Výstup s parametry, spočtenými veličinami a dalšími informacemi.
Je dobře filtrovatelný pomocí `grep :string case.scf`, např.

- `:LABEL` → informace o výpočtu (kdy, kde, jak)
- `:ENE` → celková energie
- `:RKM` → info o velikosti báze, `:KPT` → k-mesh
- `:FER` → Fermiho energie, `:GAP` → šířka zakázaného pásu
- `:QTL***` → obsazovací čísla atomu č. ***
- `:MMI***` → spinový magnetický moment atomu č. ***
- `:HFF***` → hyperjemné pole na jádře atomu č. ***
- `:EFG***` → gradient elektrického pole (V_{zz}) atomu č. ***

Monitoring běžícího/doběhlého výpočtu

- Lze filtrovat `grep :DIS case.scf` nebo jiné konvergenční kritérium.

Informace o běžícím nebo doběhlém výpočtu jsou také v souborech:

- `case.dayfile`
- `:log`

Předčasné zastavení výpočtu (korektně):

- `touch .stop` - zastaví po doběhnutí aktuální iterace
- `cancel_lapw` - zastaví běh ihned (postupně pozabíjí běžící procesy)

Získání a analýza výsledků

Některé veličiny jsou z hustoty rovnou spočteny za běhu SCF, např.:

- celková energie a Fermiho energie
- náboj uvnitř RMT, obsazovací čísla orbitalů
- magnetické momenty, většina hyperjemných parametrů

Jiné veličiny je potřeba z výpočtu dodatečně analyzovat, např.:

- rovnovážný objem, bulk modulus, ...celková energie a Fermiho energie
- hustota stavů, pásové struktura
- 3D elektronová hustota, zobecněné atomy (Baderova analýza)

... často za použití dalších programů a (někdy náročných) výpočtů:

- fononové spektrum
- spektra NMR, XAS, EELS, ...
- elektrická polarizace, piezoelektrina, optické vlastnosti, ...