สำนักหอสมุดกลาง พระจอมเกล้าลาดกระบัง

รายงานโครงงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

ทุนโครงการพัฒนานักวิจัยหน้าใหม่

โดยเงินรายได้คณะวิทยาศาสตร์

ประเภทส่งเสริมนักวิจัย

ปีงบประมาณ 2554

โครงการวิจัยเรื่อง การศึกษาสมบัติทางแม่เหล็กของสาร TMO ภายใต้สภาวะความดันที่สูงมาก

A study of magnetic property of TMO under very high pressure

โดย

รองศาสตราจารย์วิชาญ เตชิตธีระ

1 พฤษภาคม 2555

b 12779520
i

สชหมู่
เลขทะเบียน 142673
รับเมื่อ วัน เดือน ปี 23 มี.ค. 2559

สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รายงานโครงงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

ทุนโครงการพัฒนานักวิจัยหน้าใหม่

โดยเงินรายได้คณะวิทยาศาสตร์

ประเภทส่งเสริมนักวิจัย

ทุนวิจัยปีงบประมาณ 2554

รายงานฉบับสมบูรณ์

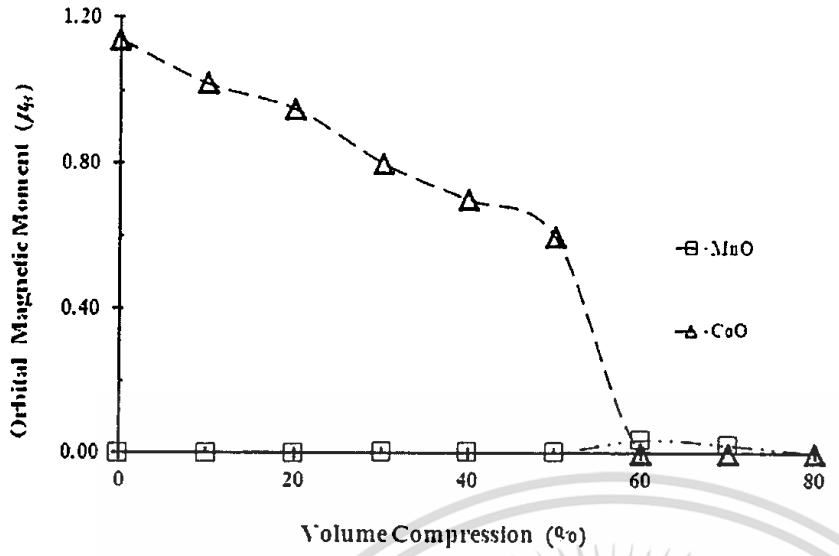
งบประมาณทั้งหมดที่ได้รับ 30,000 บาท

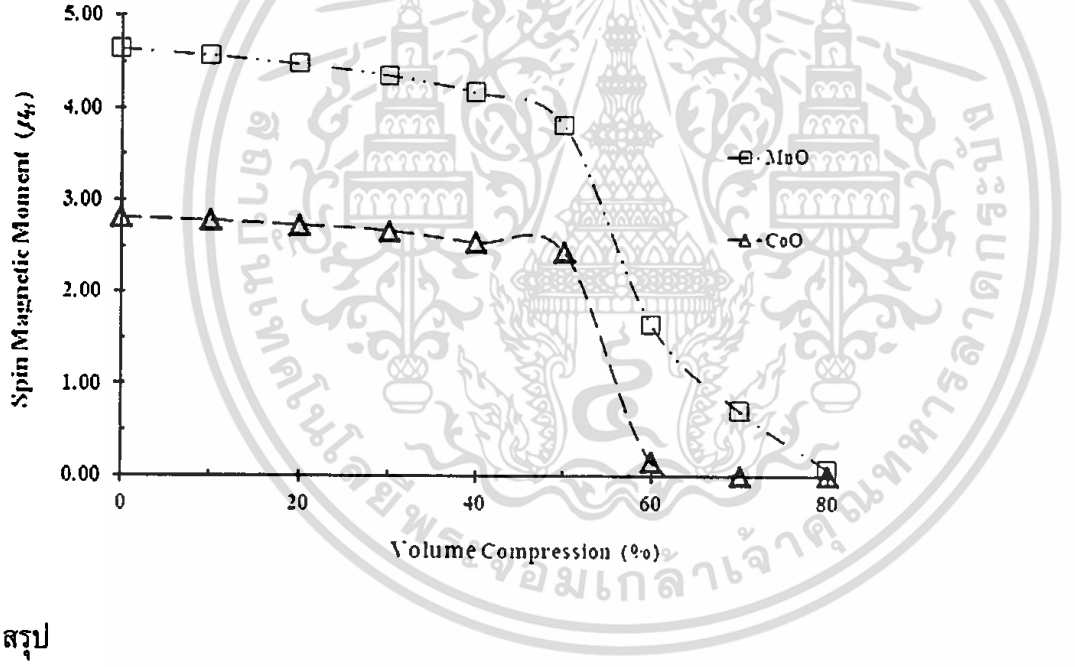
1. ชื่อโครงการวิจัย การศึกษาสมบัติทางแม่เหล็กของสาร TMO ภายใต้สภาวะความดันที่สูงมาก

A study of magnetic property of TMO under very high pressure

2.รายละเอียด จากสารกลุ่มที่สนใจคือ MnO CoO และ NiO ได้เลือกที่จะศึกษา CoO เทียบกับ MnO เป็นหลัก เนื่องจาก Mn เป็นธาตุที่ให้ค่าสนามแม่เหล็กจากสปินที่มากที่สุด ผลการวิจัยพบว่าผลที่เกิดจาก orbital magnetic moment และ spin magnetic moment เมื่อทำการคำนวณพบว่าทั้ง ทั้ง orbital magnetic moment และ spin magnetic moment ของสาร CoO เกิดการ transition เริ่มที่ค่า volume compression(VC) ≈ 50% เราจะเรียก เป็น critical VC และเป็นศูนย์ เมื่อ VC เท่ากับ 60% ส่วนสาร MnO นั้น เฉพาะ spin magnetic moment เท่านั้นที่แสดงการ transition ที่ VC ≈50% ส่วนค่า orbital magnetic moment มีค่าน้อยมากๆและไม่แสดงการ transition ที่ชัดเจน ซึ่งผลดังกล่าว แสดงดังรูปข้างล่าง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้





สรุป

โดยการใช้โปรแกรม mstudio mindlab สามารถ ใช้ในการคำนวณโครงสร้างทางแม่เหล็กทั้ง spin และ orbital ว่าขึ้นกับปริมาตรที่ลดลง(volume compression)ได้อย่างดี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

คู่มือการใช้โปรแกรม MStudio 5.0

1. บทนำ MStudio

MStudio เป็นโปรแกรมที่ใช้บนระบบปฏิบัติการวินโดว์ เพื่อใช้งานด้านวิทยาศาสตร์ ในเอกสารฉบับนี้จะอธิบายการใช้งานโปรแกรม MStudio ซึ่งมีไลบารีหลักๆ อยู่ 3 ไลบารี คือ

1 Band Lab เป็นไลบารีที่ใช้ในการกำหนดค่าพารามิเตอร์ต่างๆ เช่น ชนิดของโครงสร้าง ค่าคงที่แลตทิซ ชนิดและจำนวนอะตอม วิธีการที่ใช้ในการคำนวณสมบัติต่างๆ ทางฟิสิกส์ของผลึกของแข็ง เป็นต้น

2. DMFT Lab เป็นไลบารีที่ใช้คำนวณด้าน dynamic mean field theory

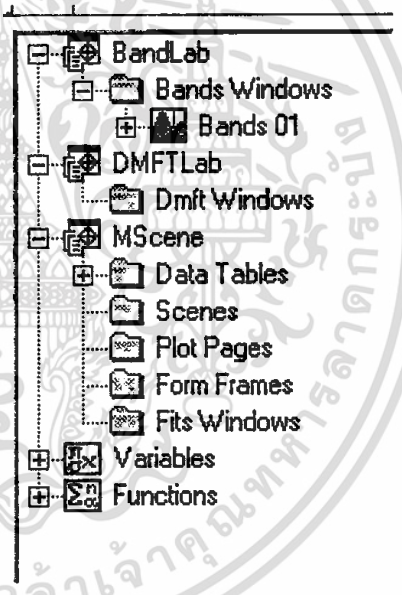
3. MSence เป็นไลบารีที่ใช้ในการแสดงผลใน 2 มิติ และ 3 มิติ ซึ่ง MScene ประกอบไปด้วย 4 หน้าต่างที่แตกต่างกันคือ

3.1 ตารางกำหนดค่าข้อมูล

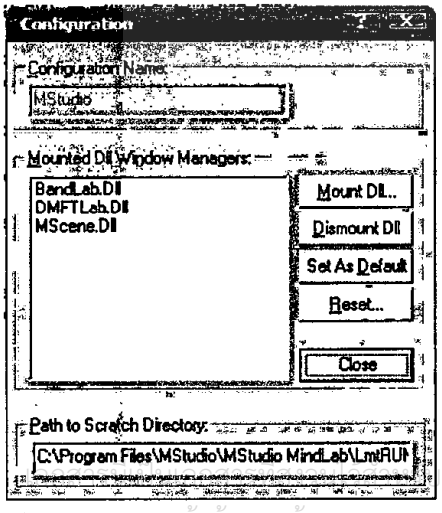
3.2 การแสดงข้อมูล 2 / 3 มิติ

3.3 รูปแบบการดัดแปลงข้อมูล

3.4 การฟิตข้อมูล



Configuration of MStudio



การกำหนด DLL ทำได้โดย เลือกเมนู Project เลือกConfiguration จะปรากฏไดอะลอกบล็อก ดังรูป แล้วเลือกไฟล์ DLL และเลือกกด Mount Dll เพื่อเมาท์ หรือ Dismount Dll เพื่อ ถ้าต้องการเอาออก

ในส่วน Path to Scratch Directory เป็นการกำหนดพาทธ์ ที่จะเก็บข้อมูลและตั้งชื่อข้อมูลนามสกุล .out (out files)

กด Set As Default เพื่อกำหนดเป็นค่า defalt

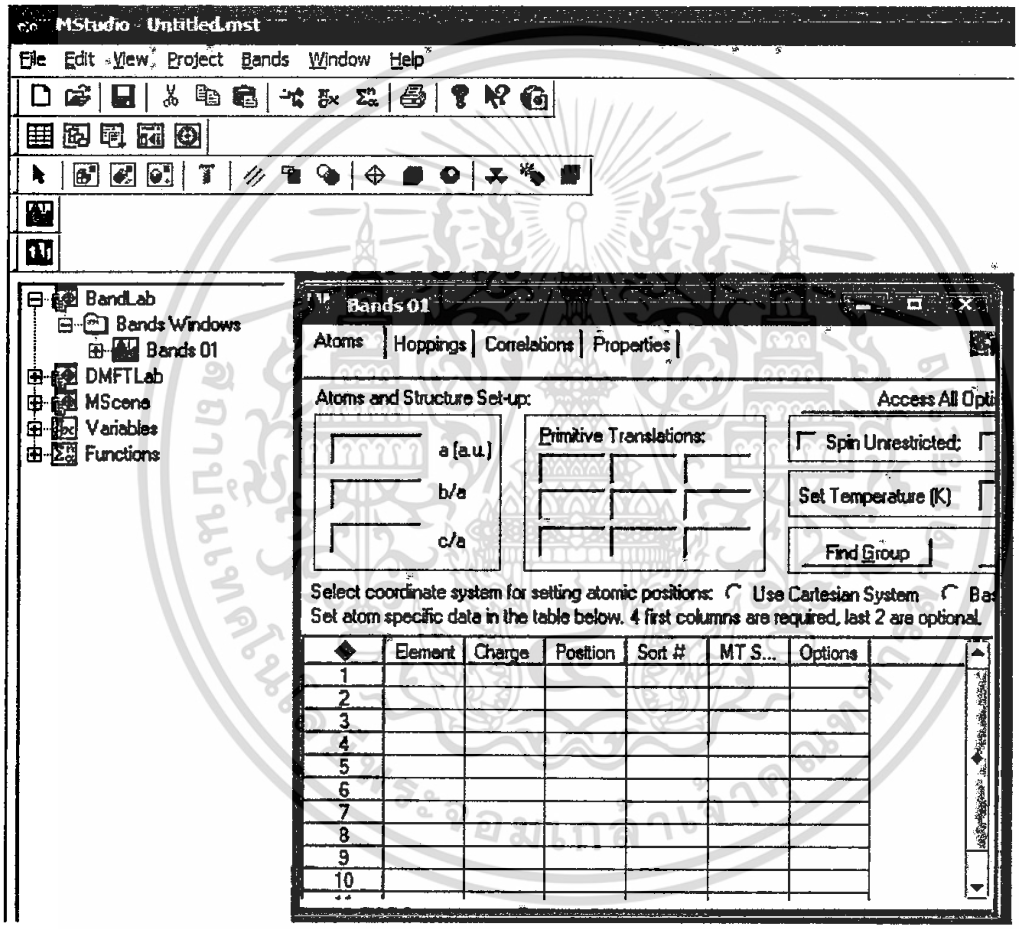
การใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2 Band Lab

BandLab เป็นโปรแกรมด้านวิทยาศาสตร์ที่ทำงานบนระบบปฏิบัติการวินโดว์โดยถูกใช้ในงานด้านการคำนวณโครงสร้างของอิเล็กตรอนในผลึกของแข็ง Band Lab เป็นไลบารีๆ หนึ่ง ที่มีอยู่ในโปรแกรม MStudio ซึ่งผลที่ได้จากการคำนวณจะแสดงผ่านไลบารี MScene

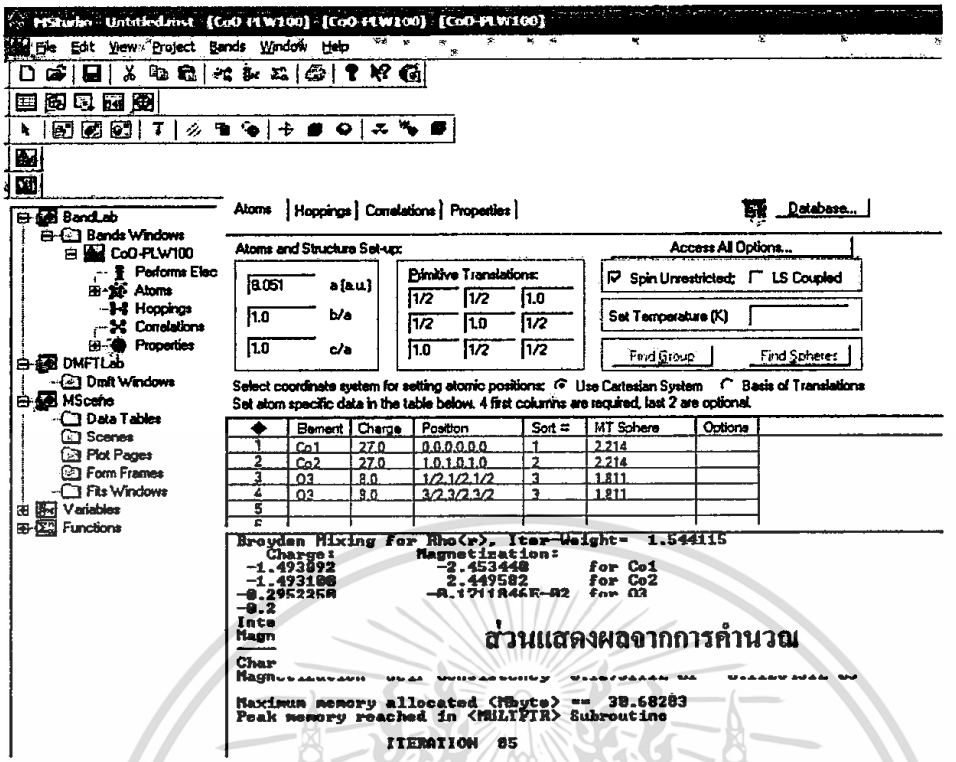
การเรียกใช้ Band Lab ทำได้โดย การกด หรือ เลือก **Project** จากเมนูบาร์ แล้วเลือก **Band Lab**

Band Lab ประกอบไปด้วยหน้าต่างๆ ดังรูป

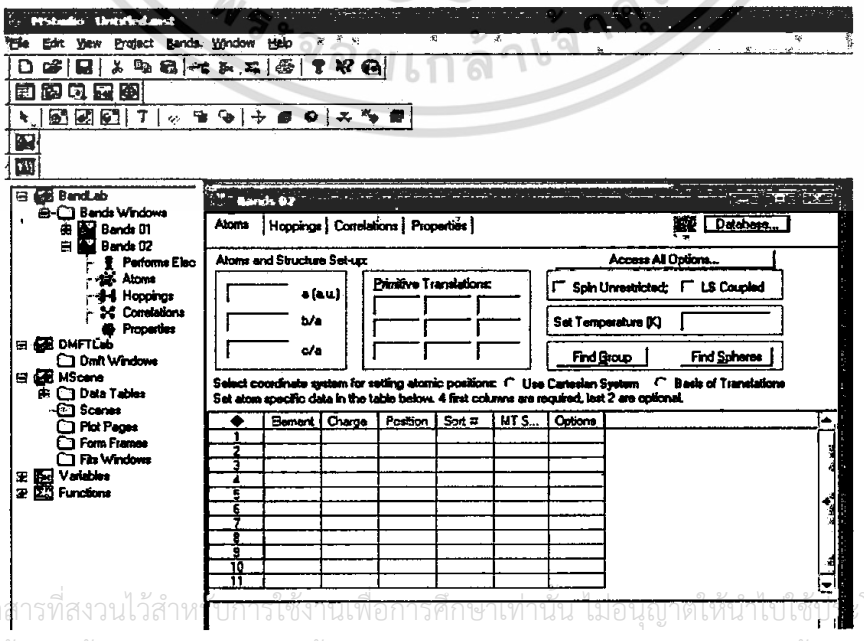


เราสาสารถเปลี่ยนชื่อ Band01 เป็นชื่ออื่นเพื่อให้สื่อถึงสิ่งที่เราจะทำ ตามที่ต้องการเช่น NiO หรือ CoO-PLW100 เป็นต้น ทำได้โดยให้คลิกขวาที่ Bands 01 เลือก Rename จะได้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



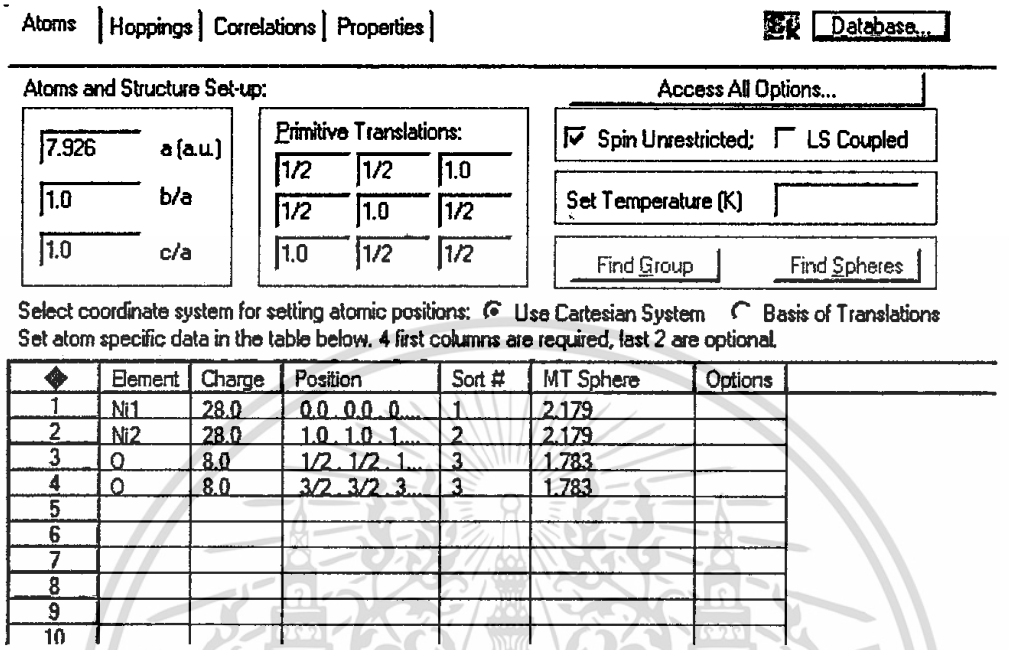
Band Lab ทำหน้าที่เตรียมข้อมูลอินพุตเท่านั้นส่วนการคำนวณ Band LB จะเรียกใช้โปรแกรม LmtART ซึ่งเป็นโปรแกรมหลักในการคำนวณ โดยที่ LmtART จะอ่านข้อมูลอินพุต แล้วทำการคำนวณหลังจากนั้นก็บันทึกข้อมูลเอาต์พุตเป็น text file นามสกุล .out ไว้ที่ C:\Program Files\MStudio\MStudio MindLab\LmtRUN\ หรือในไดเร็กทอรีตามที่เรากำหนดจาก configuration ก็ได้และจะแสดงผลจากคำนวณคุณสมบัติต่างๆ ตามที่เรากำหนด เมื่อเรากด Visualized ขณะทำการรัน LmtART จะใช้เวลานานเพียงใดขึ้นอยู่กับจำนวนอะตอมที่ใช้ในการคำนวณ และความสามารถของคอมพิวเตอร์ นอกจากนี้เรายังสามารถนำอินพุตหรือเอาต์พุตไฟล์ที่ได้ไปทำการคำนวณหรือแสดงผลที่คอมพิวเตอร์เครื่องอื่นๆ ที่มีโปรแกรม LmtART



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.1 การ Setting Atomic Data

การ Setting Atomic Data เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์ต่างๆ ทำได้โดย เลือก Atoms

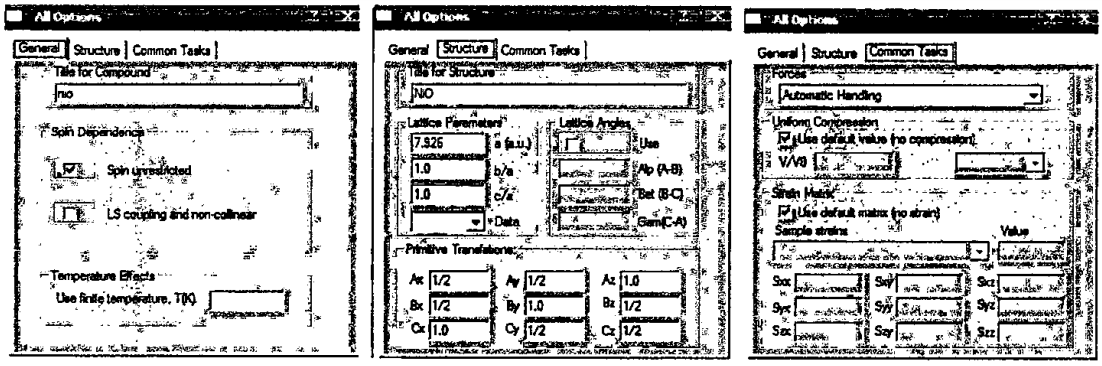


	Element	Charge	Position	Sort #	MT Sphere	Options
1	Ni1	28.0	0.0 0.0 0....	1	2.179	
2	Ni2	28.0	1.0 1.0 1....	2	2.179	
3	O	8.0	1/2 1/2 1...	3	1.783	
4	O	8.0	3/2 3/2 3...	3	1.783	
5						
6						
7						
8						
9						
10						

ในส่วน **Atoms and Structure Set-up** จะเป็นการกำหนด

1. ค่าคงที่แลตทิซ ในหน่วย a.u. (1 a.u. เท่ากับ 0.529 Angstrom)
2. b/a and c/a อัตราส่วนของด้าน b ต่อ a และ c ต่อ a ในแลตทิซ
3. Primitive translations in units of lattice parameter
4. Spin polarization และ Spin-orbit coupling, if necessary
5. Temperature. ค่า default 0 K

ถ้าต้องการกำหนดค่าพารามิเตอร์ต่างที่มากกว่านี้ให้กดปุ่ม Access All Options... . จะปรากฏหน้าต่าง General Structure และ Common Tasks ดังรูปข้างล่าง (ข้อมูลเพิ่มเติม อ่านในส่วน Access All Options)



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ในส่วนนี้จะเป็นการกำหนดชนิด ประจุ ตำแหน่ง และชนิดของอะตอมในยูนิตเซลล์

Select coordinate system for setting atomic positions: ◉ Use Cartesian System ○ Basis of Translations
Set atom specific data in the table below. 4 first columns are required, last 2 are optional.

◆	Element	Charge	Position	Sort #	MT Sphere	Options	
1	Ni1	28.0	0.0 0.0 0....	1	2.179		
2	Ni2	28.0	1.0 1.0 1....	2	2.179		
3	O	8.0	1/2 1/2 1...	3	1.783		
4	O	8.0	3/2 3/2 3...	3	1.783		
5							
6							
7							
8							
9							

ในแต่ละคอลัมบ์จากตารางจะสรุปได้เป็น

Element title ชื่ออะตอม เช่น Ni ,O, Na, เป็นต้น.

Nuclear charge ขนาดของประจุเป็นพารามิเตอร์ที่สำคัญมาก จะต้องสอดคล้องกับชื่อธาตุตามตารางธาตุ

Position ตำแหน่งของแต่ละอะตอมในยูนิตเซลล์

MT Sphere รัศมีของ MT sphere ถ้าเราไม่ระบุค่า โปรแกรม LmtART จะคำนวณให้

ถ้าในยูนิตเซลล์มีอะตอมชนิดเดียวกันหลายอะตอมจะต้องระบุในคอลัมน์ Sort ให้แตกต่างกัน เช่นจากตารางข้างบนจะพบว่ามีอะตอมของ Ni1 และ Ni2 เป็นอะตอมชนิดเดียวกัน (มี charge เท่ากัน แต่มี spin ต่างกัน) จะต้องระบุชนิดของอะตอม Sort ให้แตกต่างกัน เช่นเป็น 1 และ 2 ตามลำดับ ส่วน O เป็นอะตอมที่ไม่คิด spin ดังนั้นจึงระบุ Sort เป็น 3 นอกจากนี้ถ้าในยูนิตเซลล์มีอะตอมซ้ำกันหลายๆ อะตอม ตัวอย่างเช่น YBa2Cu3O7 มี 12 อะตอม ซึ่งประกอบด้วย Y Ba Cu1 และ O4 อย่างละ 1 อะตอมCu2, O1, O2, และ O3 อย่างละ 2 อะตอม ดังนั้นในคอลัมน์ Sort จึงกำหนดให้

1 แทนอะตอม Y@1

2 แทนอะตอม Ba@2 และ Ba@3,

3 แทนอะตอม Cu1@4,

4 แทนอะตอม Cu2@5,

5 แทนอะตอม O1@6 และ O1@7

6 แทนอะตอม O2@8 และ O2@9

7 แทนอะตอม O3@10 และ O3@11

8 แทนอะตอม O4@12

เมื่อ El@N : ชื่อธาตุที่ตำแหน่ง N

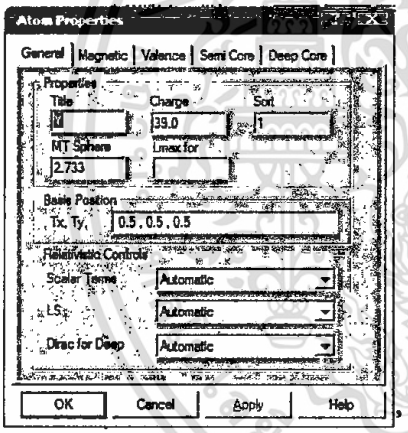
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Select coordinate system for setting atomic positions: ◉ Use Cartesian System ○ Basis of Translations
Set atom specific data in the table below. 4 first columns are required, last 2 are optional.

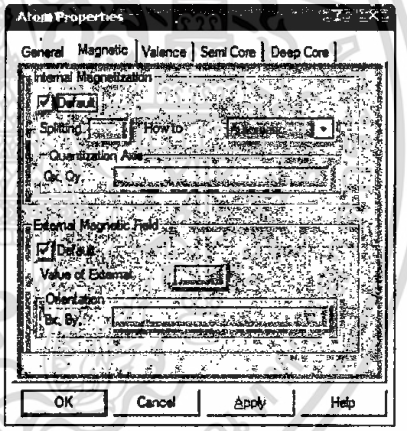
	Element	Charge	Position	Sort #	MT S...	Options
1	Y	39.0	0.5 0.5	1	2.733	
2	Ba	56.0	0.5 ...	2	3.538	
3	Ba	56.0	0.5 ...	2	3.538	
4	Cu1	29.0	0.0 ...	3	1.852	
5	Cu2	29.0	0.0 ...	4	1.93	
6	Cu2	29.0	0.0 ...	4	1.93	
7	O1	8.0	0.0 ...	5	1.818	
8	O2	8.0	0.5 ...	6	1.712	
9	O2	8.0	0.5 ...	6	1.712	
10	O3	8.0	0.0 ...	7	1.758	
11	O3	8.0	0.0 ...	7	1.758	
12	O4	8.0	0.0 ...	8	1.642	
13	O4	8.0	0.0 ...	8	1.642	

นอกจากนี้ถ้าต้องการพารามิเตอร์ อื่นให้คลิกซ้ายตรงหมายเลขในคอลัมม์แรก จะเกิดแถบสีเขียว ดังรูปข้างบนกลังจากนั้นให้คลิกขวา เลือก properties จะปรากฏไดอะล็อกบอกซ์ Atomic properties ดังรูปข้างล่าง เลือกที่ General หรือ Magnetic หรือ Valence หรือ Semi Core หรือ Deep Core เพื่อทำการกำหนดค่าพารามิเตอร์ต่างๆ

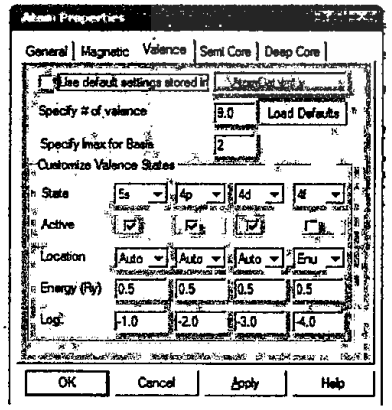
General



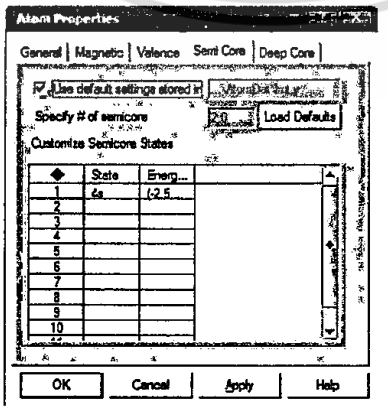
Magnetic



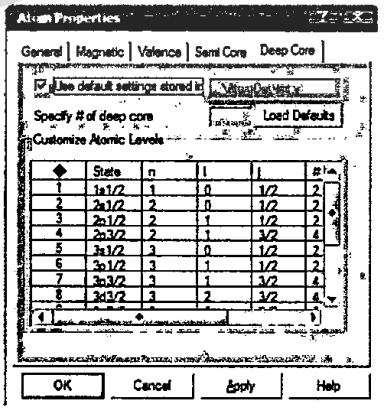
Valence



Semi Core

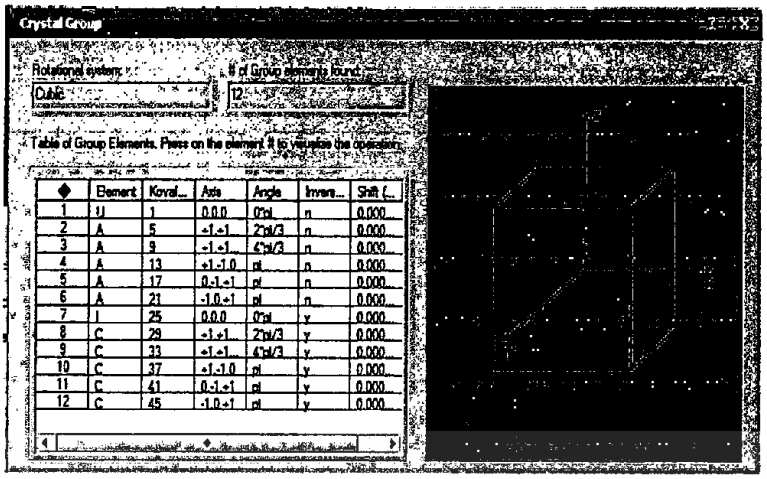


Deep Core



กดปุ่ม Find Group เพื่อหา Group ของธาตุ

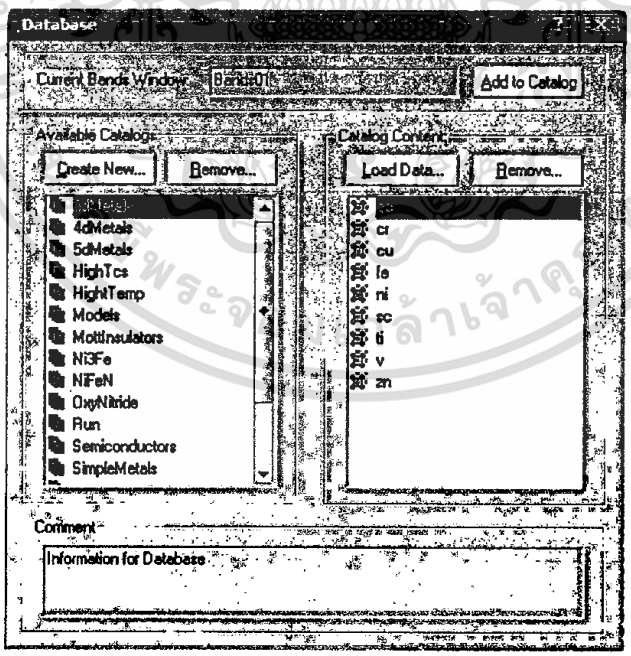
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า การแสวงหาผลประโยชน์ หรือเพื่อการอื่นใด ไม่ให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



กดปุ่ม Find Sphere **เพื่อคำนวณ** MT Sphere

	Element	Charge	Position	Sort #	MT Sphere	Options
1	Ni1	28.0	0.0	1	2.179	
2	Ni2	28.0	1.0	2	2.179	
3	O	8.0	1/2	3	1.783	
4	O	8.0	3/2	3	1.783	
5						
6						

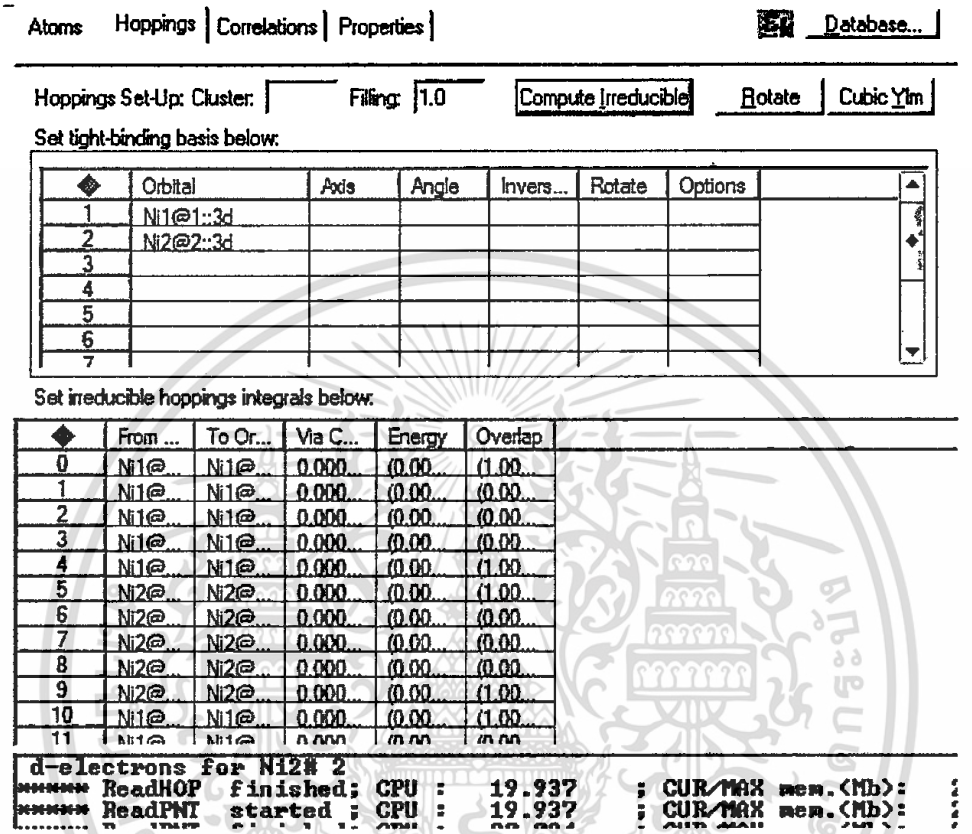
กด Database... **เพื่อเรียกข้อมูลจาก database ของโปรแกรมที่มีอยู่ จะปรากฏบล็อก เลือกข้อมูลที่ต้องการ แล้วกด** Load Data



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2 การ Setting Hopping Integrals

การคำนวณโครงสร้างในโหมด tight-binding integral นั้นจำเป็นต้องกำหนดค่าการ Hopping integrals ก่อนเสมอซึ่ง Tight-binding เป็นสิ่งที่สำคัญที่จะทำให้เข้าใจถึงพันธะเคมีของวัตถุต่างๆ



Band Lab มี 2 ทางที่จะทำงานในโหมด tight-binding.

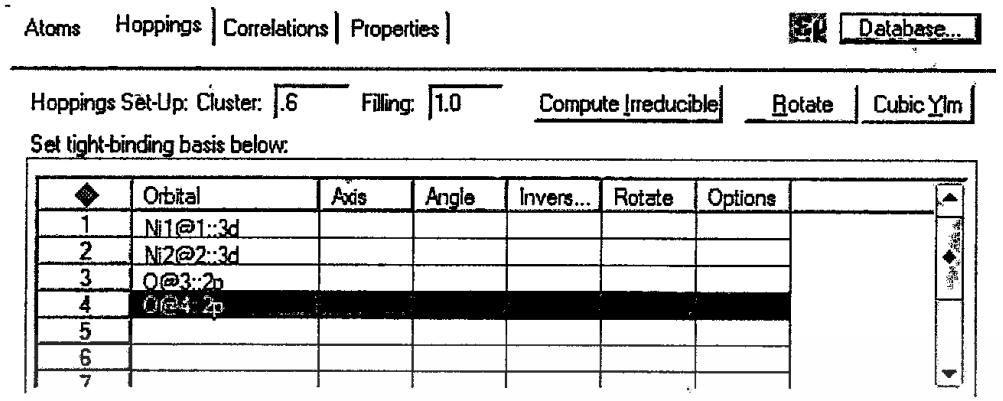
1. tight-binding LMTO คือการคำนวณ band structure calculation และยกเลิก tight-binding integrals มีข้อเสียคือมี hopping integrals จำนวนมากถูกยกเลิก ดังนั้นหลังจากเลือกการ hopping ที่ต้องการได้แล้วต้องทำการวิเคราะห์การ hopping เหล่านั้นด้วยตนเอง แต่มีข้อดีคือจะทำให้ได้การ l hopping ทั้งหมดของระบบ

2 กำหนดการ hopping integrals และทำการฟิตโครงสร้างโดยการปรับเปลี่ยนค่าอินพุต ข้อดีคือมีการเปลี่ยนแปลง hoppings integrals หลายๆ ค่า แต่ข้อเสียคือเราต้องรู้ว่า hoppings มีความสำคัญก่อนทำการวิเคราะห์

ปกติแล้วถ้าจำเป็นต้องทำการ tight binding ขั้นแรกคือต้องคำนวณการ hopping ทั้งหมดที่เป็นไปได้ แล้วทำการเลือกการ hopping ที่มีความสำคัญมากที่สุดไว้และตัดการ hopping ที่ไม่มีความสำคัญออก เพื่อความรวดเร็วในการคำนวณ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การกำหนดค่าอินพุตที่ใช้ในการ hopping



Hopping Set-Up:

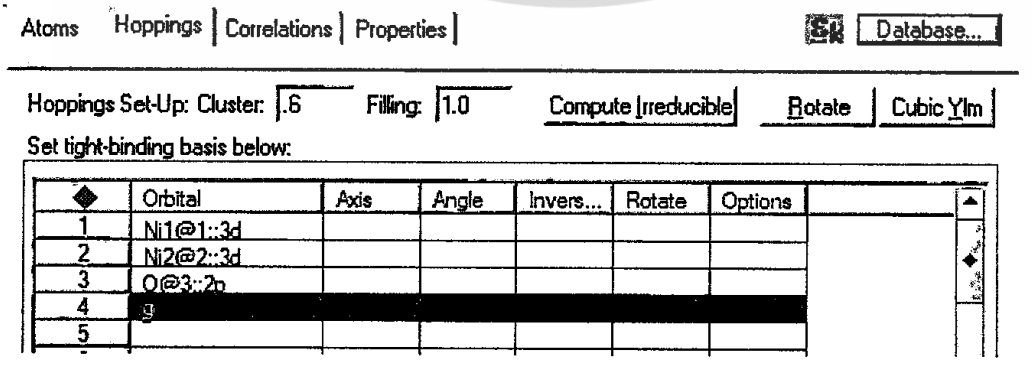
Cluster : ขนาดของทรงกลมที่เราพิจารณาว่ามีอะตอมอยู่ใกล้กันมากที่สุด โดยปกติเราจะให้ความสำคัญของการ hopping ที่เกิดขึ้นระหว่างอะตอมที่อยู่ติดกันเท่านั้น

Filling: จำนวนอิเล็กตรอนที่เจอที่ระดับเฟอร์มิ

Tight-binding basis: กำหนด orbitals ซึ่งแทน tight-binding basis. ตัวอย่าง เช่น NiO จะพิจารณาอิเล็กตรอนในระดับชั้นพลังงาน 3d ของนิเกิล (Ni) และอิเล็กตรอนในระดับชั้นพลังงาน 2p ของออกซิเจน(O)

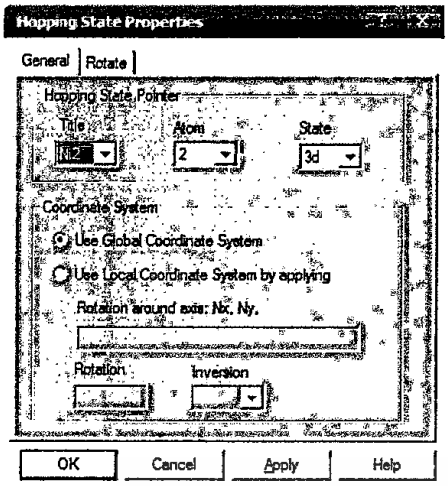
รูปแบบที่ใช้ในการกำหนดออร์บิทัล คือ El@N::nl เมื่อ El คือชื่ออาตุ N คือเลขตำแหน่งของธาตุ n และ l คือเลขควอนตัมหลักและเลขควอนตัมออร์บิทัล ตามลำดับ

ตัวอย่างเช่น NiO Ni ในออร์บิทัล 3d จะเขียนแทนด้วย Ni@1::3d Ni@2::3d และ oxygen ในออร์บิทัส 2p จะเขียนแทนด้วย O@3::2p, O@4::2p ตามลำดับ. การกำหนดค่าต่างๆ ข้างต้นอาจจะใช้วิธีพิมพ์ทั้งหมด หรือเพื่อความรวดเร็วและถูกต้องให้พิมพ์อะไรก็ได้ในคอลัมน์ Orbital

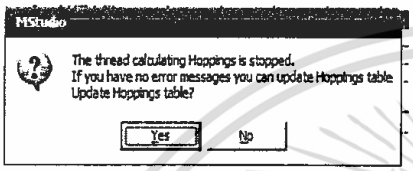


หลังจากนั้นให้คลิกซ้ายตรงตัวเลขหน้าอักษรที่เราพิมพ์ จะปรากฏแถบสีเขียว ให้คลิกขวา แล้วเลือก properties จะปรากฏไดอะล็อกบล็อก Hopping State Properties ดังรูป

ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



คลิกซ้ายที่ Title Atom และ State เพื่อเลือกธาตุ ตำแหน่งอะตอม และออร์บิทัล ตามลำดับ แล้วกด OK รายละเอียดการกำหนดอะตอม อานเพิ่มเติมที่ LmtART manual หลังจากกำหนดค่าต่างๆ ของการ Hopping ครบแล้วให้กด Compute Irreducible เพื่อทำการคำนวณการ Hopping ขณะทำการคำนวณจะแสดงค่าให้เห็นทางหน้าต่างด้านล่างสุด เมื่อคำนวณเสร็จจะปรากฏ



ให้ตอบ Yes ข้อมูลการ Hopping จะปรากฏที่ Set irreducible hopping integrals (ถ้าตารางข้างล่างไม่ว่าง จะไม่มีการแสดงข้อมูลใหม่ที่คำนวณได้ ดังนั้นก่อนกด Compute Irreducible ต้องลบข้อมูลในตาราง Set irreducible hopping integrals เสียก่อน ซึ่งการลบสามารถทำได้โดยคลิกซ้ายตรงตัวเลขในแถวที่จะลบ แล้วเลือก delete)

Set irreducible hoppings integrals below:

◆	From Orbital	To Orbital	Via Connection	Energy	Overlap
0	Ni1@1-up::3d{yz}	Ni1@1-up::3d{yz}	0.00000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(1.00000,0.00000)
1	Ni1@1-up::3d{yz}	Ni1@1-up::3d{zx}	0.00000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
2	Ni1@1-up::3d{yz}	Ni1@1-up::3d{x2-...	0.00000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
3	Ni1@1-up::3d{x2-y2}	Ni1@1-up::3d{yz}	0.00000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
4	Ni1@1-up::3d{x2-y2}	Ni1@1-up::3d{x2-...	0.00000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(1.00000,0.00000)
5	Ni1@1-up::3d{yz}	O@4-up::2p{x}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
6	Ni1@1-up::3d{yz}	O@4-up::2p{y}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
7	Ni1@1-up::3d{zx}	O@4-up::2p{x}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
8	Ni1@1-up::3d{zx}	O@4-up::2p{y}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
9	Ni1@1-up::3d{zx}	O@4-up::2p{z}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
10	Ni1@1-up::3d{x2-y2}	O@4-up::2p{x}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)
11	Ni1@1-up::3d{x2-y2}	O@4-up::2p{y}	0.50000,0.00000,0.00000	(0.00000,0.00000)	(0.00000,0.00000)

```
Smax=  5.304022     ; Accuracy= 0.2152549E-28; # of vectors=  1257
Min.energy for using Evald"s method= -3.282133     Ry
Total # of connecting vectors found      7

***** Vecgen   finished; CPU :   1.0620     ; CUR/MAX mem.(Mb):   1.09     /  1.03
 ============================================================
No band structure calculation
```

ตารางแสดงการ Hopping ของอิเล็กตรอน จากออร์บิทัลหนึ่ง (From) ไปยังออร์บิทัลอื่นๆ (To)

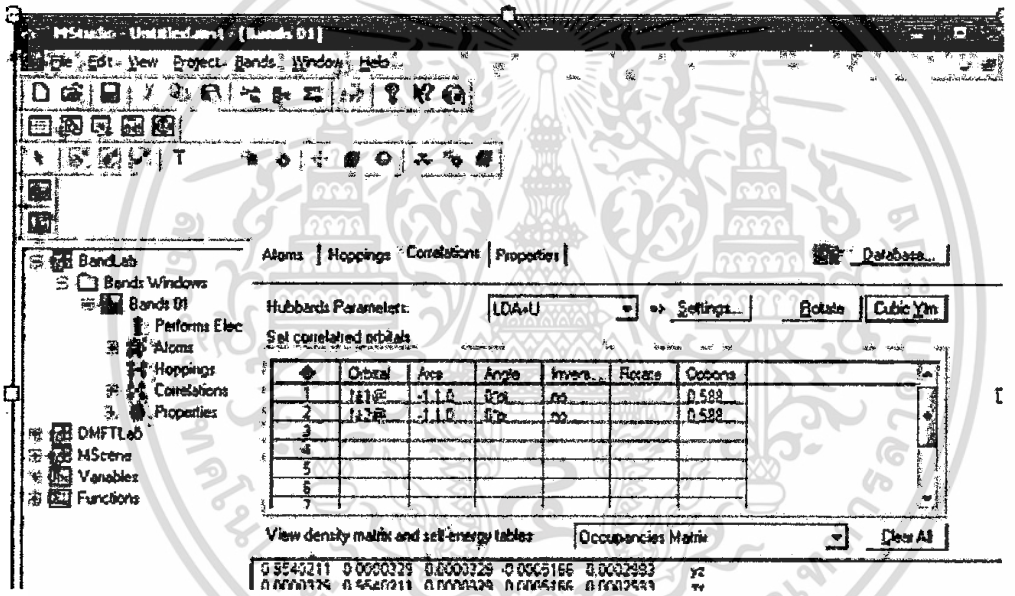
ตัวอย่างเช่น Ni 3d มี 5 ออร์บิทัล คือ Ni@1::3d{xy}, Ni@1::3d{yz}, Ni@1::3d{zx}, Ni@1::3d{x2-y2}, Ni@1::3d{3z2-1}. ถ้าคอลัมน์ Via Connection มีค่าเป็น 0,0,0 การ hopping จะอยู่ในระดับในออร์บิทัลนั้นๆ และคอลัมน์ Overlap จะถูกเซตเป็น 1 แต่ถ้าค่าในค่าในคอลัมน์ Via Connection ไม่เป็น 0,0,0 ในคอลัมน์ Overlap จะถูกเซตเป็น 0 เมื่อ มีการทำงานในโหมด tight-binding

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สำหรับ Sin polarized และ spin orbital coupled จะใช้ El@N-up::nl{...} แทน spin up และ El@N-dn::nl{...} แทน spin down ตัวอย่างเช่น Ni@1-up{x2-y2} หรือ Ni@1-dn{x2-y2} เป็นต้น

2.3 การ Setting Correlations

เนื่องจาก correlations ระหว่างอิเล็กตรอนในชั้น d- หรือชั้น f- มีความสำคัญอย่างมากในการคำนวณเพื่อหาคุณสมบัติต่างๆ ทางฟิสิกส์ ซึ่งวิธีการประมาณแบบ Local density และแบบ generalized gradient นั้นไม่สามารถอธิบายระบบที่อิเล็กตรอนมี correlated กันได้ ตัวอย่างเช่น Mott-Hubbard insulator NiO ถ้าใช้วิธีการประมาณแบบ Local density และแบบ generalized gradient ในการคำนวณค่า energy gap พบว่ามีค่าประมาณ 0.3 eV ในขณะที่ค่าจากการทดลอง NiO มีค่า energy gap ประมาณ 4.3 eV จะเห็นได้ว่าค่า energy gap ที่ได้มีความแตกต่างกันมาก ทั้งนี้เนื่องจาก อิเล็กตรอนในระดับพลังงาน 3d ของ Ni มี correlation กัน ดังนั้นในการคำนวณจึงต้องเพิ่มเทอม correlation ดังกล่าวเข้าไปด้วย เช่น LDA +U GGA+U หรือ DMFT (dynamic mean field theory)

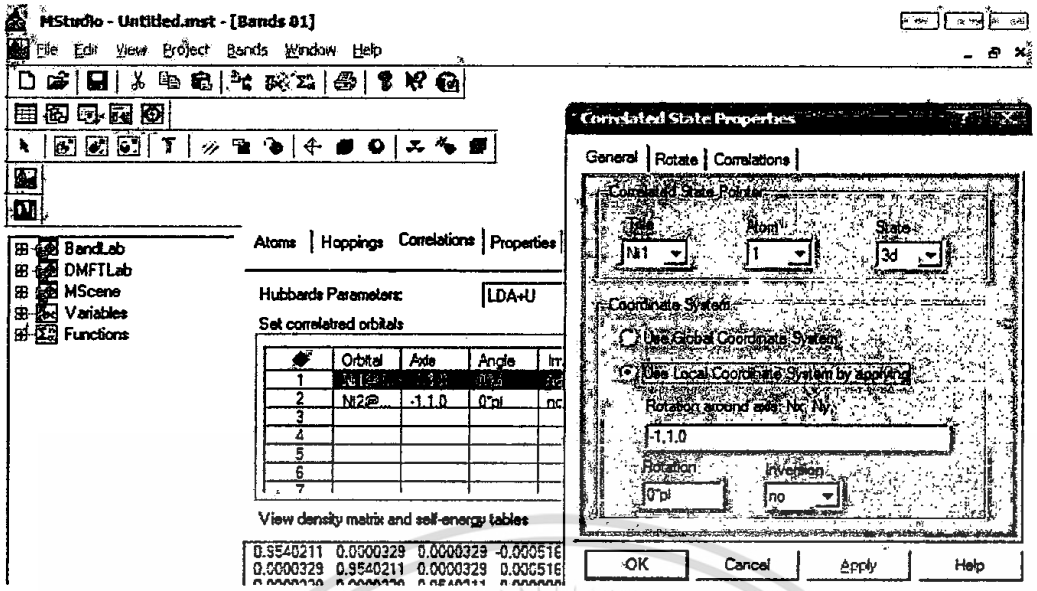


สิ่งที่จำเป็นในการ set up correlations:

การ set up จะเหมือนกับการ set up Hopping integral คือ El@N::nl เมื่อ El N n และ l คือ ชื่อธาตุ เลขตำแหน่ง เลขควอนตัมหลักและเลขควอนตัมออร์บิทัล ตัวอย่างเช่น Ni@1::3d and Ni@2::3d. ในคอลัมม์ Options นั้นจะไว้ใส่ค่า Slater integrals สำหรับอิเล็กตรอนในชั้น d จะมีพารามิเตอร์ F0, F2 และ F4 (รายละเอียดเพิ่มเติม อ่าน LmtART manual)

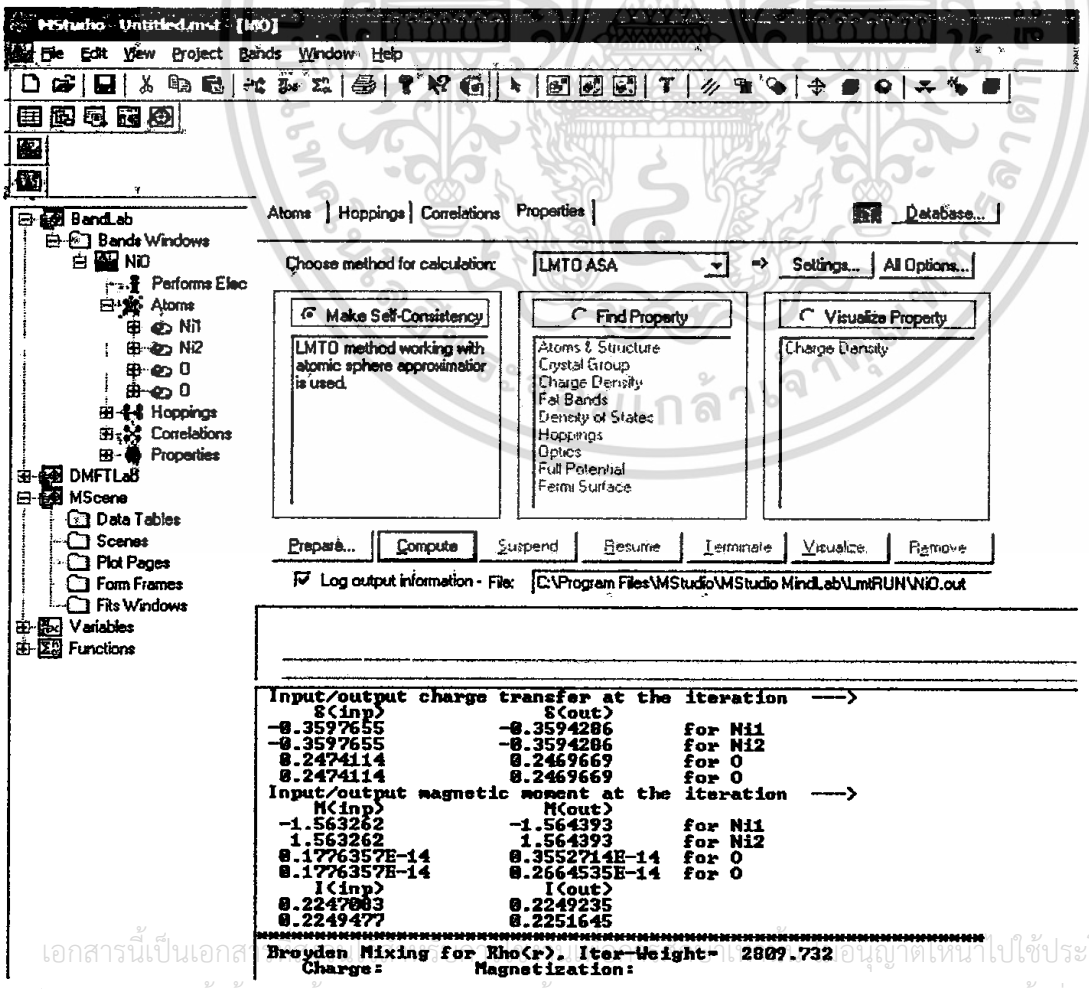
การเซต properties ต่างๆ ทำได้โดยคลิกซ้ายที่ตัวเลขหน้าแถวที่ต้องการเซตค่า จะปรากฏแถบสีเขียว จากนั้นให้คลิกขวาแล้วเลือก properties จะปรากฏหน้าต่าง ประกอบไปด้วย General Rotate และ Correlations ดังรูป

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



2.4 การคำนวณ Physical Properties

จุดประสงค์ของ Band Lab คือการคำนวณคุณสมบัติต่างๆ ทางฟิสิกส์ โดยในการาคำนวณนั้นจะใช้โปรแกรม LmtART และเมื่อคำนวณเสร็จจะใช้ Band Lab อ่านข้อมูลที่คำนวณได้ แล้วแสดงผลด้วย MScene l



เอกสารนี้เป็นเอกสาร[illegible]อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จุดประสงค์ของวินโดว์ Band คือต้องการเตรียมข้อมูลอินพุตทั้งหมด ตั้งแต่ Atoms Hoppings และ Correlations ก่อนทำการรัน LmtART

การใช้ Band Lab ในการคำนวณสามารถทำได้โดยเลือกที่ Choose method for calculation ประกอบด้วย 3 วิธี คือ

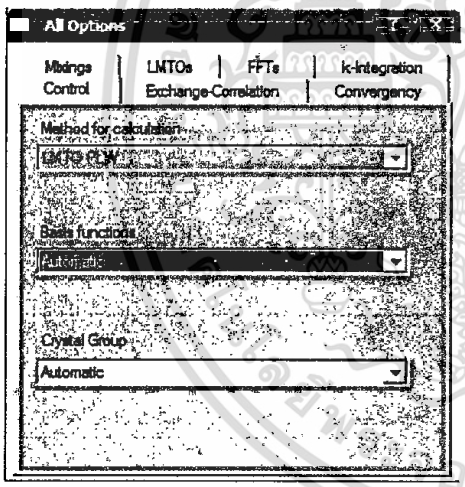
LMTO-PLW (Full potential LMTO) เป็นวิธีที่ให้ผลการคำนวณถูกต้อง แม่นยำมากที่สุด แต่จะใช้เวลาในการคำนวณนานกว่าวิธี

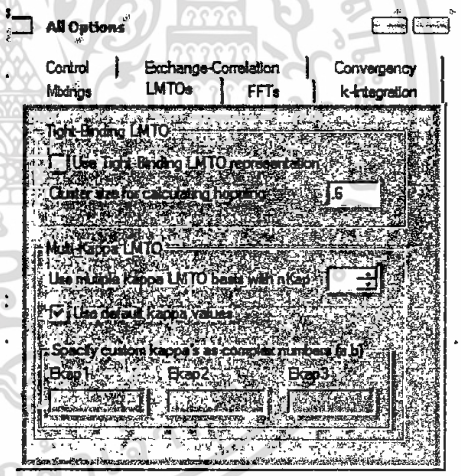
LMTO-ASA เป็นวิธีที่มีความถูกต้องแม่นยำน้อยและใช้เวลาน้อยกว่า full potential LMTO method.

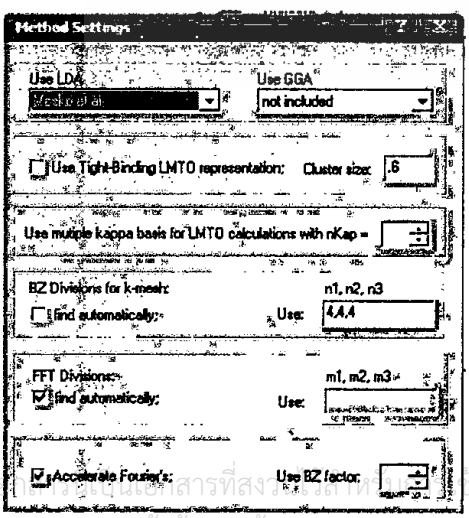
Tight-binding วิธีนี้ต้องกำหนดการ Hoppings ก่อนเสมอ และสามารถใช้ได้กับ few-band model Hamiltonians.

ในแต่ละวิธีสามารถทำการเซตค่าตางๆ เพิ่มเติมได้โดยกดที่ปุ่ม All Options

ซึ่งจะปรากฏหน้าต่าง Control parameters Exchange correlation choice Convergence criteria Mixing options LMTO options K-intergration settings Plane wave fast fourier transform settings ดังรูป







ถ้ากดปุ่ม Setting

จะปรากฏหน้าต่าง กำหนด Exchange Energy โดยใช้วิธีของ Vosko และไม่ใช้ GGA กำหนดขนาดของ Cluster nKap และ Brillouin Zone รายละเอียดเพิ่มเติม อ่าน LmtART Manual

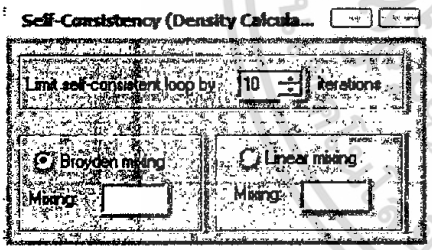
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การคำนวณด้วย LMTO-PLW และ LMTO-ASA ก่อนทำการคำนวณสมบัติต่างๆ เช่น band structure หรือ density of state (ก่อนกด Compute) ควรทำการ self-consistency ก่อน ซึ่งสามารถทำได้โดยเลือก Make Self-Consistency แล้วกด Compute การ self-consistent จะเริ่มขึ้นและแสดงผลให้เห็นในส่วนล่างของหน้าต่าง

```
Input/output magnetic moment at the iteration  --->
     M(inp)              M(out)
  -1.563262           -1.564393       for Ni1
   1.563262            1.564393       for Ni2
  0.1776357E-14       0.3552714E-14   for O
  0.1776357E-14       0.2664535E-14   for O
     I(inp)              I(out)
  0.2247003           0.2249235
  0.2249477           0.2251645
*****************************************************************
Broyden Mixing for Rho(r), Iter-Weight=  2889.732
    Charge:          Magnetization:
-0.3601239          -1.564418       for Ni1
-0.3601239           1.564418       for Ni2
 0.2477033          0.2664535E-14   for O
 0.2477033          0.2664535E-14   for O
Interst. Charge after Broyden  =-0.2248413
Magnetization over MT-spheres  = 0.5329071E-14
```

ซึ่งในการ self-consistent จะใช้เวลาค่อนข้างนานโดยเฉพาะกรณีที่สารประกอบที่คำนวณประกอบด้วยอะตอมจำนวนมากก็ยิ่งจะใช้เวลานาน แต่เมื่อคำนวณเสร็จแล้วจะสร้างไฟล์ charge density และให้ตอบ Yes

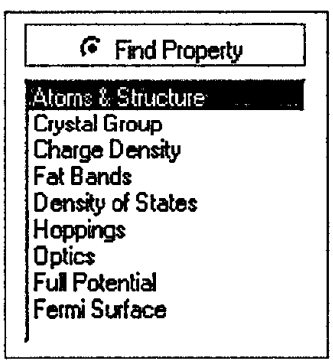
นอกจากนี้ ก่อนทำการ self-consistence ยังสามารถกำหนดจำนวนลูปที่จะทำการคำนวณ ได้โดยการกดที่ Prepare Prepare... จะปรากฏ



ข้อมูลเพิ่มเติมอ่าน LmtART Manual

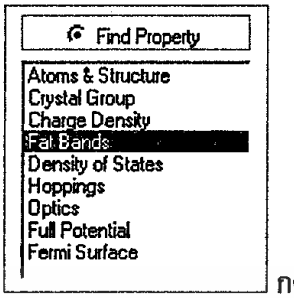
หลังจากทำการ self-consistence แล้วเราสามารถทำการคำนวณสมบัติต่าง

ตัวอย่างเช่น Atoms & Structures ให้เราเลือกที่ Find Properties และคลิกที่ Atoms & Structure ดังรูป

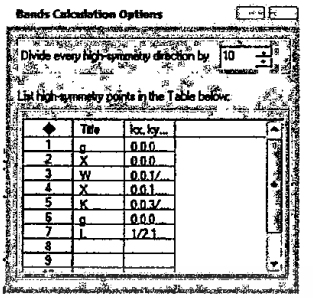


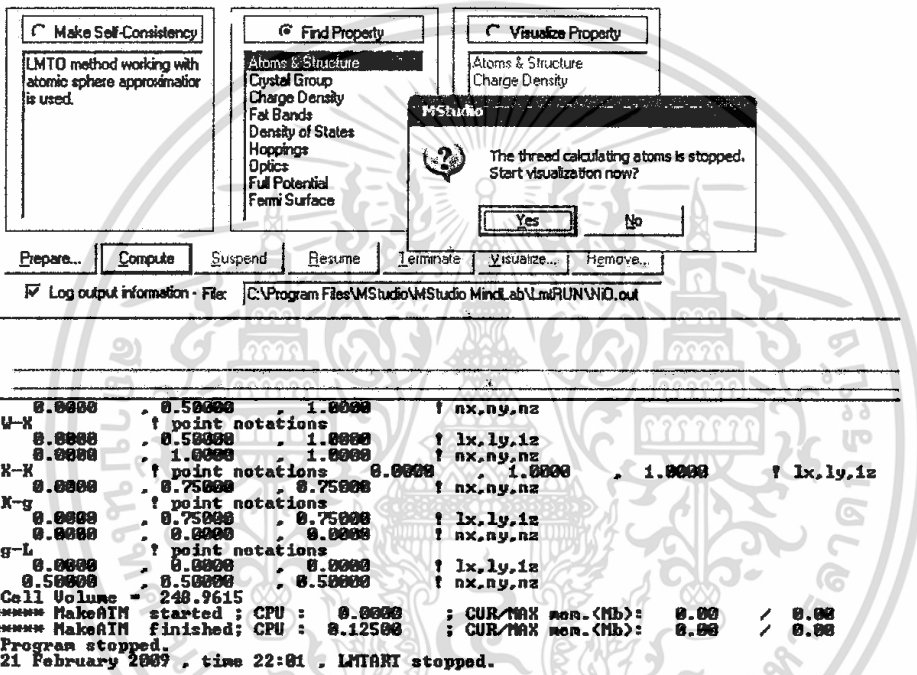
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หลังจากนั้น กด Compute เพื่อทำการคำนวณ (กด Prepare... เพื่อกำหนดพารามิเตอร์ต่างๆ ก่อน (บาง properties)) เช่น

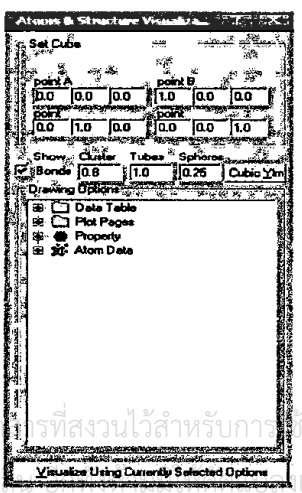


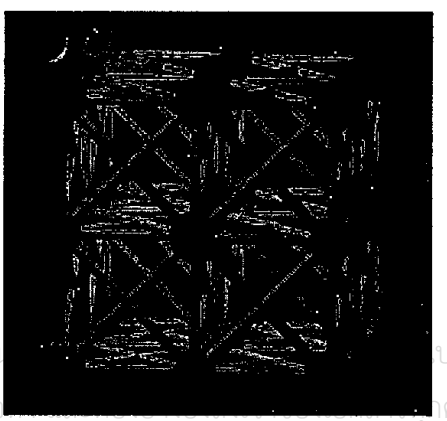
กด Prepare





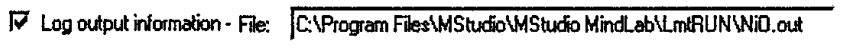
เมื่อคำนวณเสร็จจะปรากฏหน้าต่าง Start Visualization now และที่ส่วนล่างของการคำนวณจะมีข้อความ LMTART stopped ตอบ No ยังไม่แสดงผล และ ตอบ Yes เพื่อแสดงผลทันที จะปรากฏหน้าต่าง ให้เรากด Visualize Using Currently Selected Options เพื่อแสดงผล (ข้อมูลเพิ่มเติมอ่านในส่วน Visualize Property)



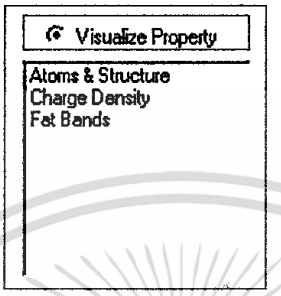


เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น และไม่อนุญาตให้ดัดแปลงเนื้อหา รวมถึงการนำไปเผยแพร่ต่อ ในครั้งที่มีการนำไปใช้

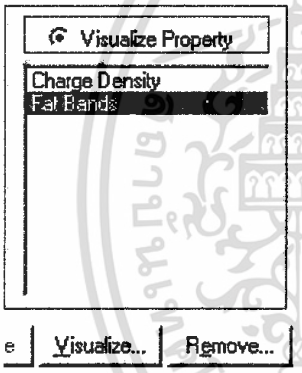
ข้อมูลที่คำนวณได้จะถูกเก็บเป็น text files นามสกุล .out ไว้ที่ไดเร็กทอรีตามที่เรากำหนด



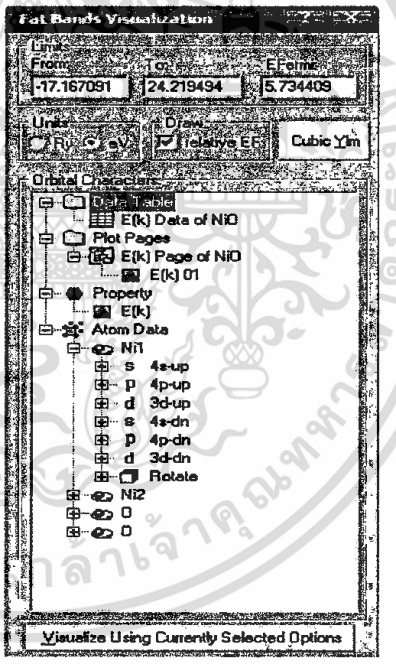
หลังจากการคำนวณเสร็จ properties ที่ทำการคำนวณจะไปปรากฏที่ Visualize properties ดังรูป



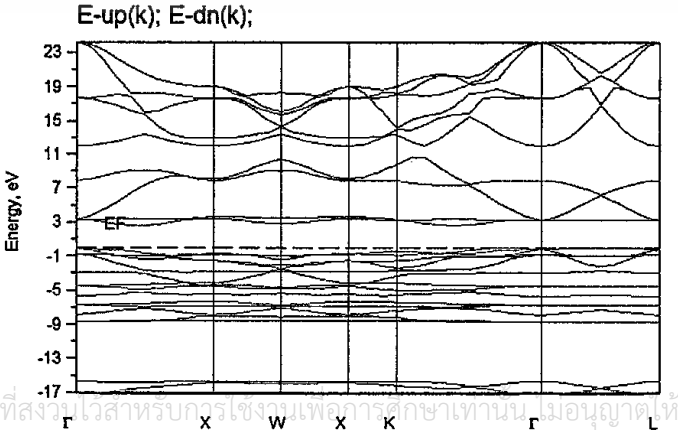
การแสดงผลให้เราเลือกไปที่ Visualize properties แล้วกดปุ่ม Visualize...



กด Visualize...



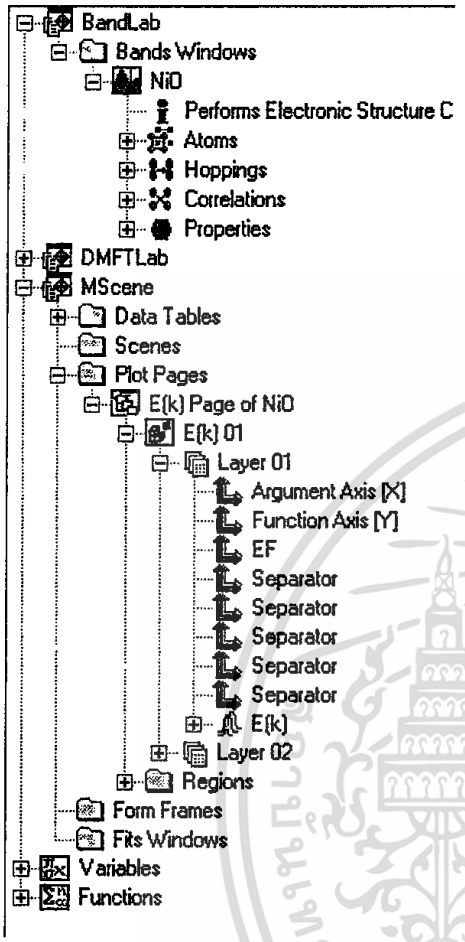
กด Visualize Using Currently Selected Options



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สำนักหอสมุดกลาง พระจอมเกล้าลาดกระบัง

การแสดงผลสามารถทำได้หลายๆ properties พร้อมๆ กัน และยังสามารถเพิ่มหรือถอนออกได้ด้วย โดยไปที่ MScence เลือก Plot Pages กด + จะปรากฏดังรูป



คลิกขวา ในส่วนที่ต้องกี่ Plot เลือก properties

เช่น เลือก E(k)

จะปรากฏหน้าต่าง ที่ให้เราเลือกว่าจะ plot อะไรในกราฟ

(ข้อมูลเพิ่มเติม .....อ่านต่อไปที่ภาคผนวก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

142673

ภาคผนวก

1.. การใช้ข้อมูลจาก Data Base

โปรแกรม MStudio Mind Lab จะมีฐานข้อมูลไว้ให้จำนวนหนึ่งเพื่อความสะดวก เราสามารถเรียกใช้ฐานข้อมูลเหล้านั้นได้โดย กด Database... หรือกด Import... ที่เมนู file จะปรากฏหน้าต่าง

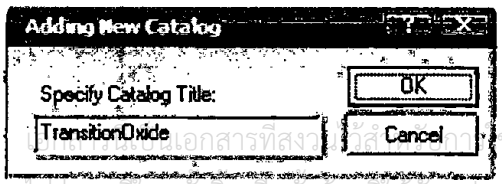
เลือกข้อมูลที่ต้องการ แล้วกด Load Data

2.. การบันทึกข้อมูล (save files)

การบันทึกข้อมูลมี 2 แบบ คือ

1 กด save หรือ save as ที่เมนู files จะเป็นการบันทึกข้อมูลทั้งหมดเป็นนามสกุล .mst ซึ่งไฟล์นี้สามารถเรียกใช้งานได้เฉพาะข้อมูลที่ทำการบันทึกไว้ทั้งหมด

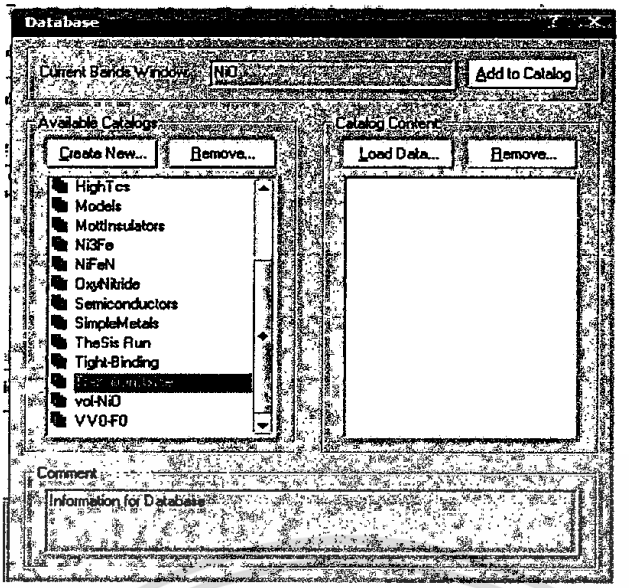
2. กด Export... จะปรากฏหน้าต่างเหมือนกันกับกด DataBase เลือก Create New ถ้าต้องการสร้างโฟลว์เดอร์ในการเก็บข้อมูลใหม่ จะปรากฏหน้าต่าง



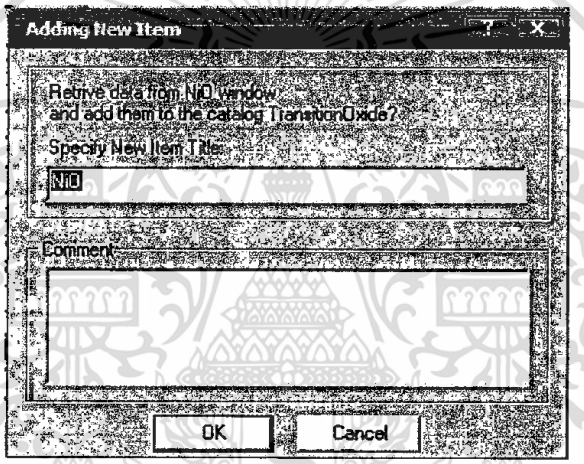
พิมพ์ชื่อโฟลว์เดอร์ เช่น Transition Oxide

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

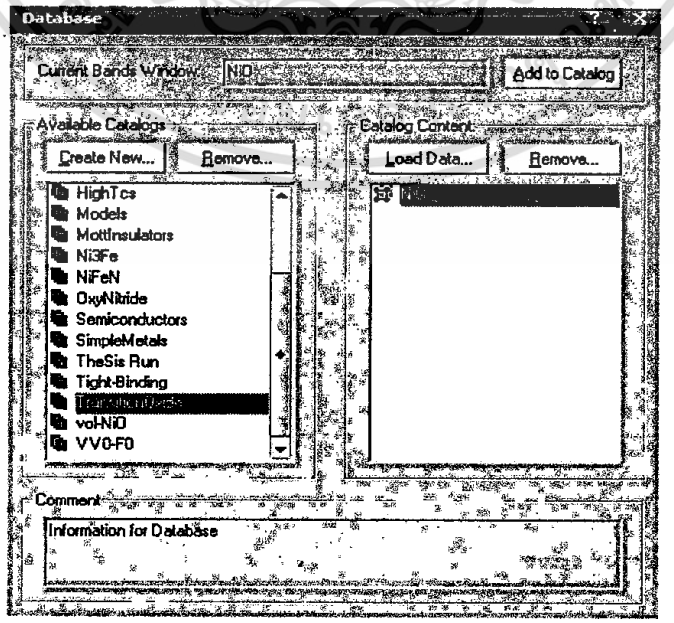
กด OK จะได้



กด Add to Catalog จะปรากฏ

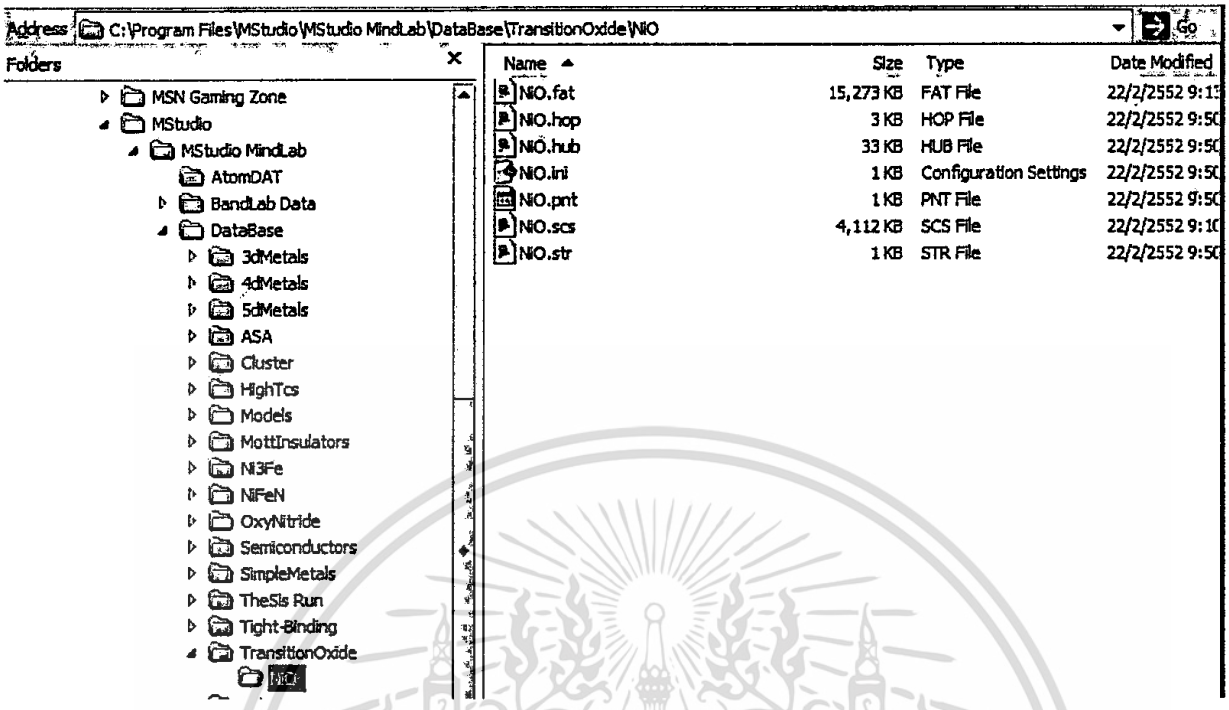


กด OK



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ชื่อโฟลว์เดอร์ C:\Program Files\MStudio\MStudio MindLab\DataBase\

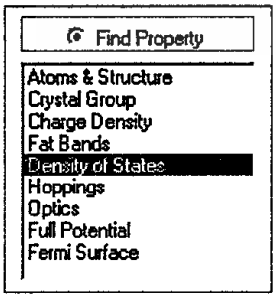


ข้อมูลเพิ่มเติมอ่านที่ LmtART Manual **เกียวกับไฟล์** .ini .hop .hup **และอื่นๆ**

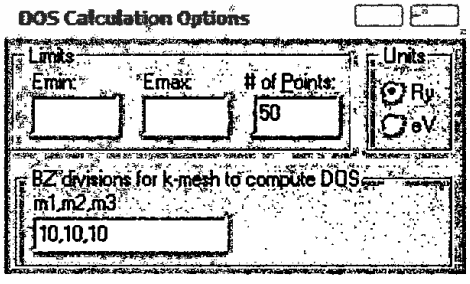
3.. LmtART program

LmtART **เป็นฟรีโปรแกรมทางวิทยาศาสตร์ที่เขียนด้วยภาษาฟอร์แทนพื่อใช้ในการคำนวณ** electronic structure **ข้อมูลเพิ่มเติมอ่านที่** LmtART Manual

4 การคำนวณ Density of States (DOS)

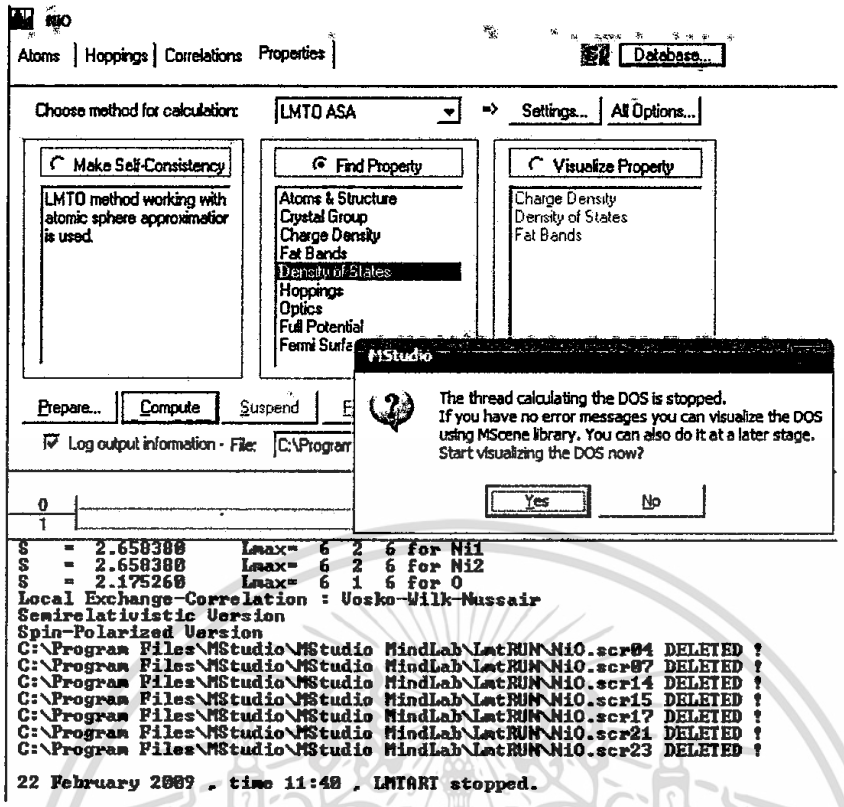


กด Prepare

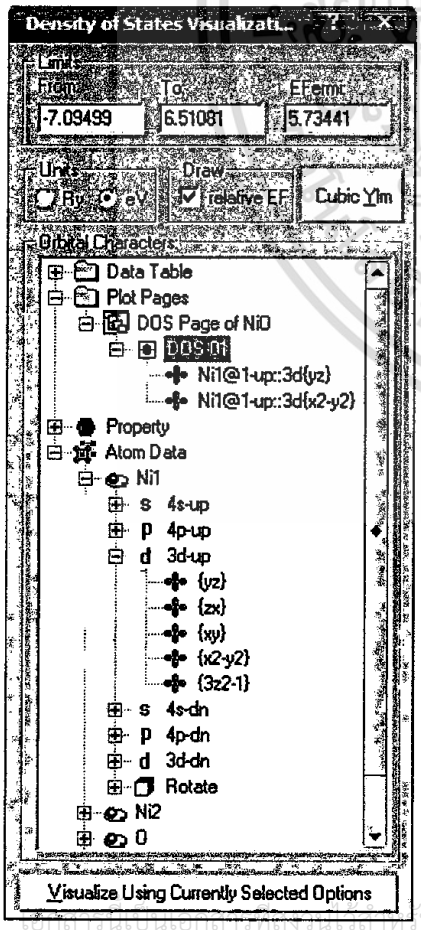


ในการคำนวณ Density of State (DOS) **ต้องกำหนดค่า** minimum and maximum energies **ในหน่วย** Ry **หรือ** eV **และช่วงของ** Emax – Emin **และแบ่งช่วง** Brillouin zone **เช่น** 10,10,10 **หลังจากนั้นกด** Compute

ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

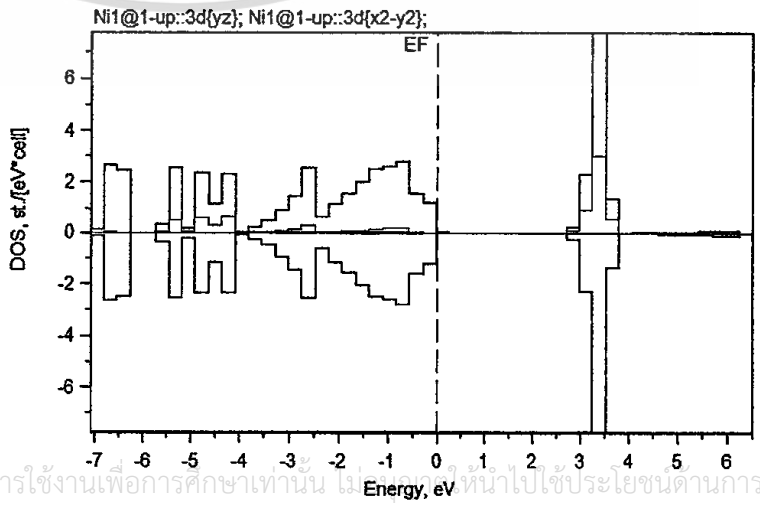


โปรแกรม LmtART จะทำการคำนวณ และเมื่อคำนวณเสร็จ ถ้าต้องการแสดงผลทันที่ให้กด Yes



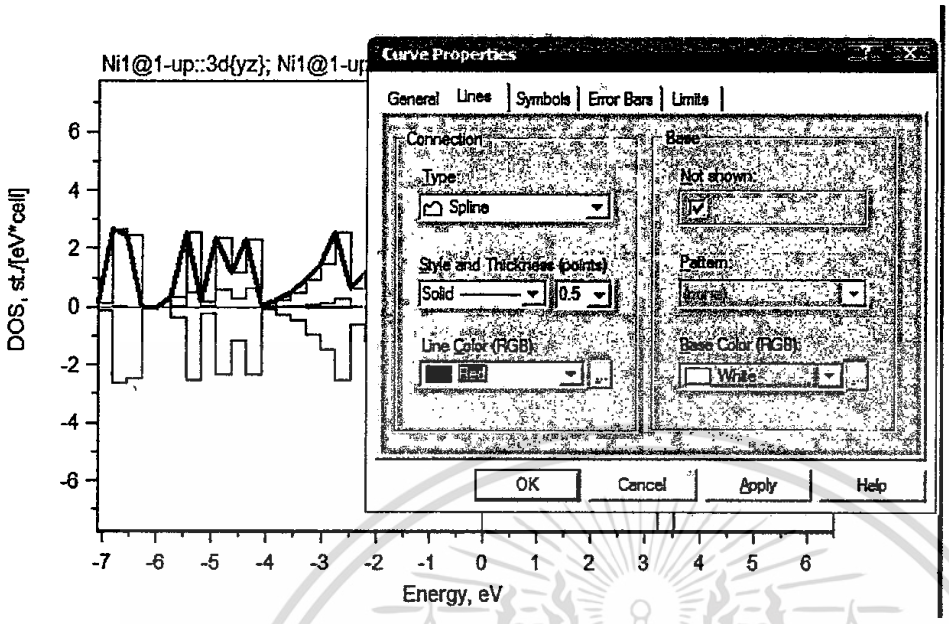
เราสามารถเลือก plot ข้อมูลในส่วน Atom Data เช่นต้องการ plot Density of state –ของ Ni1 ในระดับ 3d –up ในออร์บิทัล {yz} (t2g) และ {x2-y2} (eg) ก็ทำได้โดยใช้เมาส์คลิกซ้ายค้างไว้ที่ส่วนที่ต้องการ แล้วลากไปวางใน โฟลว์เดอร์ Plot Pages ดังรูป

แล้วกด

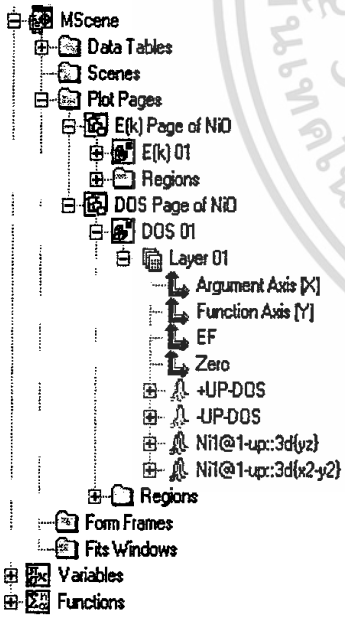


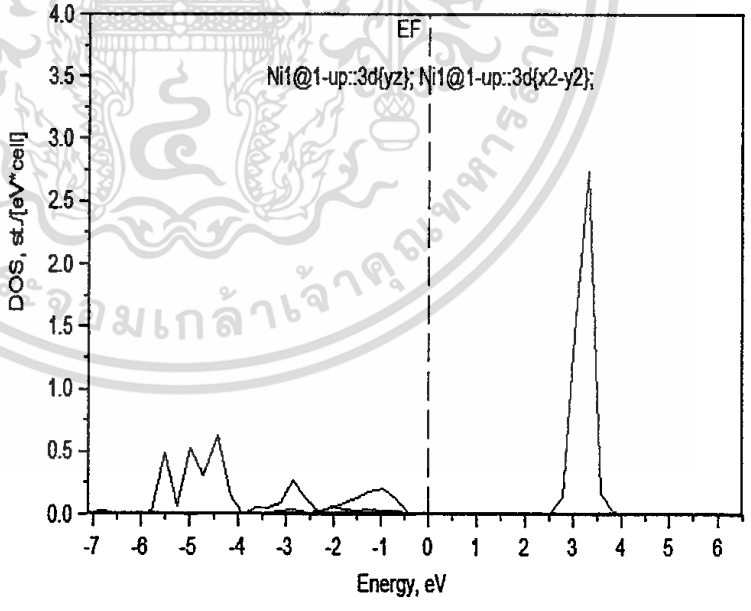
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ถ้าต้องการ fit กราฟ ก็สามารถทำได้โดยดับเบิลคลิกซ้ายในเส้นกราฟที่ต้องการฟิต



ถ้าเราไม่ต้องการแสดงข้อมูลส่วนใด ก็ให้เป็นที่ MScence — Plot Pages เช่นไม่ต้องการแสดง +UP-DOS ก็ให้คลิกขวา ที่ +UP-DOS แล้วเลือก Hide และถ้า Hide อยู่ก็ให้เลือก Show Curve





Properties อื่นๆ ก็ทำในลักษณะคล้ายกัน

ข้อมูลเพิ่มเติมอ่านที่ /C:/Program Files/MStudio/MStudio MindLab/Manuals

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้