

دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده فیزیک

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

به عنوان بخشی از ملزومات برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته
فیزیک ماده چگال

عنوان

راهنمای لاتک برای نوشتن پایان‌نامه در دانشگاه صنعتی اصفهان

نگارش

مرصاد مستقیمی

اساتید راهنما

دکتر محمود اشرفی زاده

دکتر سید جواد هاشمی فر

استاد مشاور

دکتر مجتبی اعلایی

اردیبهشت ۱۳۹۷



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده فیزیک

پایان‌نامه کارشناسی ارشد کارشناسی ارشد

راهنمای لاتک برای نوشتن پایان‌نامه در دانشگاه صنعتی اصفهان

نگارش: مرصاد مستقیمی

در تاریخ ۱۳۹۷/۲/۴ توسط کمیته‌ی تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

استاد راهنما: آقای دکتر محمود اشرفی‌زاده امضاء:

استاد راهنما: آقای دکتر سیّد جواد هاشمی‌فر امضاء:

استاد مشاور: آقای دکتر مجتبی اعلایی امضاء:

استاد ممتحن مدعو: خانم دکتر نفیسه رضایی امضاء:

استاد ممتحن داخلی : آقای دکتر اسماعیل عبدالحسینی سارسری امضاء:

سرپرست تحصیلات تکمیلی: آقای دکتر فرهاد شهبازی امضاء:

حقوق و مالکیت

کلیه حقوق مالکیت مادی و معنوی مربوط به این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان و پدیدآورندگان است. این حقوق توسط دانشگاه صنعتی اصفهان و بر اساس خط مشی مالکیت فکری این دانشگاه، ارزش‌گذاری و سهم‌بندی خواهد شد. هر گونه بهره‌برداری از محتوا، نتایج یا اقدام برای تجاری‌سازی دستاوردهای این پایان‌نامه تنها با مجوز کتبی دانشگاه صنعتی اصفهان امکان‌پذیر است.

مرصاد مستقیمی

امضاء

نوآوری‌ها

- محاسبه توابع بیشینه جایگزیده وانیر با استفاده از کد FPLO
- نوشتن برنامه تولیدکننده ورودی های کد WANNIER90
- بررسی ساختارهای زنجیره کربن و سیلیسین و بررسی عملکرد کدهای فوق در این ساختارها

سپاس‌گزاری

جا دارد از دوستانی که در تهیه این قالب به من کمک نموده‌اند تشکر کنم. آقایان علیرضا قوامی‌نیا، فرشاد قریبی، دکتر سید حسین موسوی و خانم‌ها بامداد و همچنین دوستان عزیزم در دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان . همچنین از دکتر محمود اشرفی‌زاده نیز قدردانی می نمایم

مرصاد مستقیمی
اردیبهشت ۱۳۹۷

فهرست مطالب

سپاس‌گزاری شش

فهرست تصاویر نه

فهرست جداول ده

فهرست نمادها یازده

چکیده دوازده

مقدّمه ۱

فصل ۱ نصب texlive ۲

۱.۱ دانلود آخرین نسخه . . . ۲

۱.۱.۱ نصب روی ویندوز . . . ۲

۲.۱.۱ نصب در لینوکس . . . ۵

۳.۱.۱ نصب در مکینتاش . . . ۶

۲.۱ نصب ویرایشگر . . . ۷

۳.۱ ساختار فایل‌های لاتک . . . ۹

فصل ۲ فونت و نویسه‌ها ۱۱

۱.۲ انواع فونت‌ها در رایانه . . . ۱۱

۲.۲ فونت در xepersian . . . ۱۲

۳.۲ اندازه فونت . . . ۱۲

۴.۲ فونت فارسی و انگلیسی . . . ۱۵

۵.۲ نحوه تعریف فونت های دیگر . . . ۱۵

۶.۲ فونت‌های مورد نیاز قالب iut-thesis ۱۵

فصل ۳ نمونه‌ها و ابزارها **۱۶**

۱.۳ مقدمه ای بر استفاده از بسته‌ها ۱۶

۲.۳ فرمولها ۲۱

۳.۳ درج اشکال و تصاویر ۲۳

۴.۳ مرجع‌دهی تصویر ۲۴

۵.۳ انواع لیست درLaTeX ۲۶

۱.۵.۳ لیست بدون ترتیب ۲۶

۲.۵.۳ لیست های دارای ترتیب ۲۷

۳.۵.۳ ایجاد لیست با عنوان دلخواه ۲۸

۶.۳ نوشتن جداول ۲۸

۷.۳ قالب دهی به جدول و تعریف آن به صورت شناور ۲۹

۸.۳ تعریف جدول به صورت شناور و نحوه ارجاع دادن به آن ۲۹

۹.۳ tikz و استفاده از آن ۳۳

۱۰.۳ محیط های ریاضی ۳۴

۱.۱۰.۳ قضیه انتخاب ۳۴

فصل ۴ فهرست‌ها **۳۶**

۱.۴ فهرست مطالب ،اشکال و جداول ۳۶

۲.۴ لغتنامه و فهرست اختصارات ۳۶

پیوست الف نمونه‌هایی برای وارد کردن کد برنامه‌ها **۳۸**

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی **۴۱**

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی **۴۲**

فهرست اختصارات **۴۳**

مراجع **۴۴**

فهرست تصاویر

۱.۱ نمایی از فایل ها و فولدرهای موجود در پوشه TeXLive2015 . . . . . ۲

۲.۱ پیام انتهایی در پایان Uninstall برنامه TeXLive ۳

۳.۱ برای نصب TeXLive حتما گزینه Run as Administrator را انتخاب کنید. ۳

۴.۱ در بین صفحات نصب TeXLive2015 در یک صفحه از شما مسیری که می‌خواهید این برنامه در آن نصب شود، پرسیده می‌شود. ۴

۵.۱ پنجره‌ای که در آن روند نصب بسته‌های LaTeX نشان داده می‌شود. ۴

۱.۲ تعریف اندازه فونت برای فونت های انگلیسی ۱۳

۲.۲ تعریف اندازه فونت برای فونت های انگلیسی ۱۳

۳.۲ مثالی از تغییر اندازه فونت با دستور fontsize ۱۴

۱.۳ توابع وانییر بیشینه جایگزیده ساخته شده از نوار s یا سه نوار p در GaAs[۲] ۲۵

۲.۳ الف : توابع بلوخ متناظر با سه نقطه k مختلف در یک بعد در فضای واقعی که قسمت سبز رنگ، مربوط به پوش $e^{i\mathbf{k}r}$ است. ب : توابع وانیر جایگزیده که فضای متناظر با سمت چپ را تنیده است[۲] ۲۵

۳.۳ ایشان آقای لاپلاس است ۲۶

۴.۳ روندنمای محاسبه‌ی توابع وانییر بیشینه جایگزیده ۳۵

فهرست جداول

۱.۱ جدول برخی کلاسهای در لاتک ۱۰

۲.۱ جدول برخی تنظیمات کلاسهای در لاتک[۱] ۱۰

۲.۳ انتخاب‌های مختلف برای قسمت شعاعی توابع حدس اوّلیّه، $\alpha = Z/a$ [۳]. ۳۰

۳.۳ توابع زاویه‌ای ۳۱

۴.۳ نمونه‌ای دیگر از جدول ۳۱

۵.۳ انتخاب‌های مختلف برای قسمت شعاعی توابع حدس اوّلیّه،$\alpha = Z/a$ [۳]. ۳۲

فهرست نمادها

مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α

درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$
مجموعه اعداد طبیعی ..... $\mathbb{N}$
آلفا ..... α
درجه سلسیوس ..... $^{\circ}C$

چکیده

در این قالب پایان‌نامه نمونه‌هایی برای نوشتن یک پایان‌نامه و یا متن در محیط لاتک توضیح داده می شود در ابتدا نصب تکلایو روی سیستم عامل‌های مختلف توضیح داده می‌شود و همچنین تنظیمات مربوط به IDE بیان می شود و در ادامه ابزارهای پرکاربرد مانند تغییرات فونت،رسم تصویر و شکل و جدول، فرمول‌نویسی، مرجع زنی و فهرست‌های مختلف مانند لغت نامه و اختصارات، نوشتن کد به زبان‌های مختلف و... آمده است. برای مطالعه این فایل لازم است همراه با خوانش فایل PDF دستوراتی که منجر به تولید این پایان‌نامه می‌شود را در فایل کد منبع لاتک آن دنبال کنید. برای نوشتن پایان‌نامه خودتان فقط کافی است جایی را که با نام و عناوین مربوط به استاد راهنما و یا نام نویسنده به صورت متغیر آمده است با عبارات مطلوب خود پرکنید. کلاس این پایان‌نامه طوری طراحی شده است که مقادیر داده شده را طبق یک تنظیم استاندارد جایگذاری می‌کند. از این رو تنها کاری که شما باید در نوشتن پایان‌نامه با این قالب انجام دهید صرفا جایگذاری مقادیر خودتان است. سعی شده است تا جای ممکن حتی در کدهای درون قالب نیز توضیحات مفصلی داده شود.

واژه‌های کلیدی: قالب پایان‌نامه، دانشگاه صنعتی اصفهان، امرکز ابررایانش ملی ایران

مقدّمه

مقدمه در این‌جا آورده شود ...

فصل ۱

نصب texlive

۱.۱ دانلود آخرین نسخه

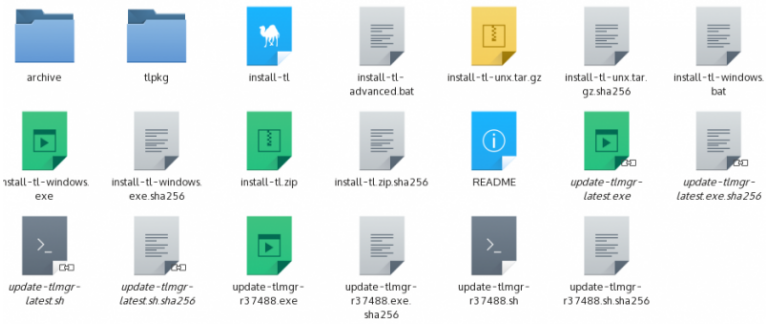
ابتدا باید ایمیج برنامه را از یکی از میرورهای سایت CTAN دانلود کنید. دانشگاه یزد در آدرس

http://tug.ctan.org/systems/texlive/Images/

فایل iso مربوط به texlive را به اشتراک می گذارد. این فایل iso را باید در ویندوز با یکی از برنامه‌های اجرا گر اصطلاحاً مانت کنیم. در نسخه‌های جدید ویندوز(ویندوز هشت به بعد) با دو بار کلیک روی فایل ایزو خود به خود مانت می‌شود. در ویندوزهای قدیمی برای بارگذاری فایل ایمیج می توان از برنامه‌هایی نظیر poweriso استفاده کرد. همچنین می توان این ایمیج را روی یک DVD رایت نمود و از آن استفاده کرد. برنامه‌های رایت مانند nero می‌توانند فایل ایمیج را روی DVD بنویسند.

۱.۱.۱ نصب روی ویندوز

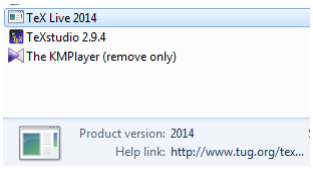
دو روند کلی برای نصب TeXLive در این صفحه آموزش داده می‌شود. هر دو روند نتیجه یکسانی را در برخواهند داشت. در هر دو روند فرض شده است که شما DVD نصب TexLive را به نحوی در اختیار دارید. شکل زیر نمایی از فایل‌های موجود در این DVD را برای TexLive2015 نشان می‌دهد. برای مثال فرض کنید که می‌خواهیم



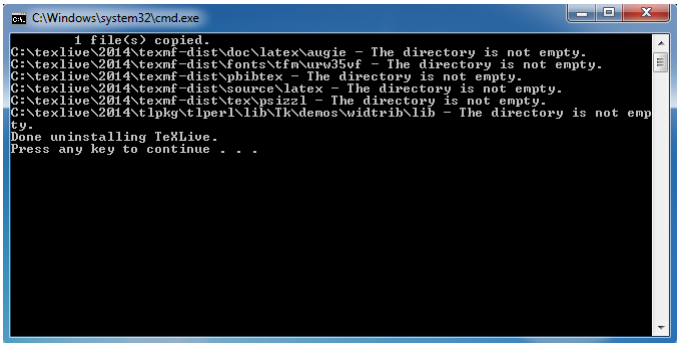
شکل ۱.۱ – نمایی از فایل ها و فولدرهای موجود در پوشه TeXLive2015

TeXLive2015 را بر روی سیستم‌عامل ویندوز نصب کنیم. ددر روش نصب ساده شما کافی است که پنج گام زیر را طی کنید. البته قبل از آن یقیین حاصل کنید که در درایوی که می‌خواهید TeXLive را نصب کنید فضای کافی وجود دارد. به عنوان نمونه برای TeXLive2015 شما نیازمند حدود ۴ تا ۵ گیگ فضا هستید.

۱. ابتدا اگر توزیع TeX دیگری دارید، و یا نسخه قدیمی‌تری از TeXLive را دارید به طور کامل پاک کنید. گرچه نسخه‌های دیگر TeX و حتی نسخه‌های گذشته TeXLive نیز می‌تواند به همراه نسخه جدید وجود داشته باشد، اما بهتر است که این‌کار انجام شود. به عنوان مثال برای پاک کردن نسخه قدیمی TeXLive به منوی Control Panel بروید و از آن‌جا به بخش Programs and Features بروید و TeXLive نسخه قدیمی را پاک کنید. با این کار یک صفحه سیاه رنگ باز می‌شود، منتظر بمانید تا پیام Press any key ظاهر شود، آن‌گاه می‌توانید



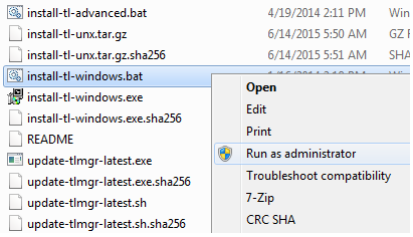
یقین کنید که نسخه قبلی TeXLive به صورت موفقیت آمیز پاک شده است. در ضمن می‌توانید باقیمانده



شکل ۲.۱ – پیام انتهایی در پایان Uninstall برنامه TeXLive

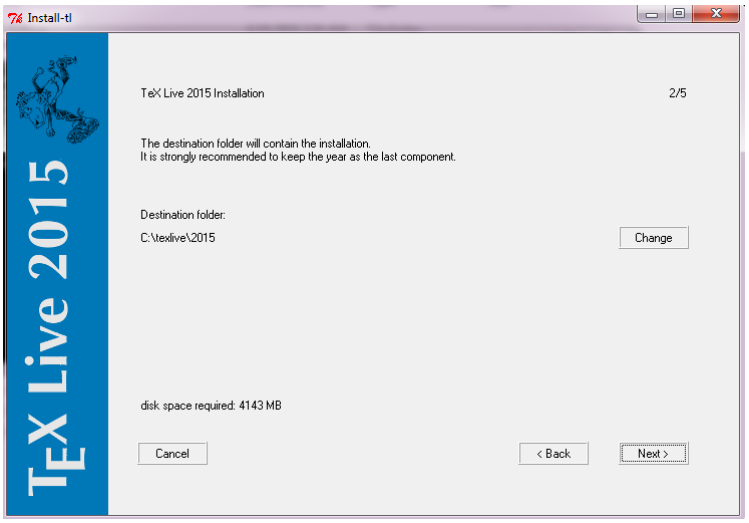
فایل‌ها را نیز با مراجعه به پوشه نصب TeXLive که به صورت پیش‌فرض در پوشه‌ای به نام texlive در درایو C قرار دارد، پاک کنید.

۲. به پوشهٔ TeXLive بروید. روی فایل install-tl-advanced.bat دابل کلیک کنید. (نکته: در ویندوزهای vista به بعد باید روی فایل فوق کلیک راست کنید و Run As Administrator را بزنید.)



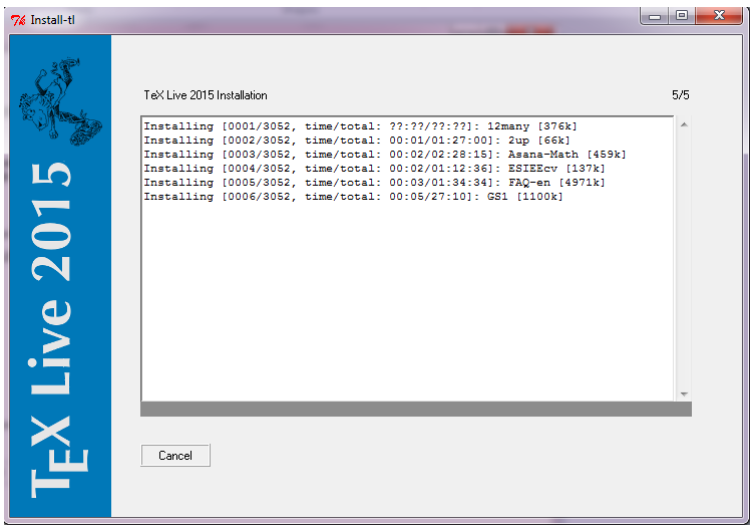
شکل ۳.۱ – برای نصب TeXLive حتما گزینه Run as Administrator را انتخاب کنید.

۳. روی Install TexLive کلیک کنید تا نصب شروع شود. دقت کنید که در TeXLive2015 باید چندین پنجره را Next بزنید تا در آخرین صفحه این دکمه را مشاهده کنید.



شکل ۴.۱ – در بین صفحات نصب TeXLive2015 در یک صفحه از شما مسیری که می‌خواهید این برنامه در آن نصب شود، پرسیده می‌شود.

۴. بعد از فشردن کلید Install TexLive پنجره‌ای به شما نشان داده می‌شود که بیانگر روند نصب بسته‌های TexLive است. دقت کنید که به صورت همزمان یک پنجره cmd نیز باز است که این پنجره نیز روند نصب را به شما نشان می‌دهد. صبر کنید تا هنگامی که در انتهای نصب باید پیغام Wellcome to TeX Live را بگیرید.



شکل ۵.۱ – پنجره‌ای که در آن روند نصب بسته‌های LaTeX نشان داده می‌شود.

۵. روی دکمه Finish کلیک کنید.

۲.۱.۱ نصب در لینوکس

دقت کنید که ما در این مجال دستورات را برای لینوکس Ubuntu و Mint آورده‌ایم. برای مابقی Linux ها دقیقا کارهای مشابهی را باید انجام داد.

نصب به صورت command Line

ابتدا اگر بسته‌های تک‌لایو از قبل نصب دارید، با زدن دستور زیر در ترمینال حذف کنید.

```
sudo apt-get remove texlive-*
```

یک ترمینال باز کنید. به مسیر پوشه TeX Live بروید. لیست فایل‌های موجود در پوشهٔ TeX Live تقریباً باید به این صورت باشد:

```
iran@iran:~$ cd /media
iran@iran:/media$ dir
floppy floppy0 texlive
iran@iran:/media$ cd texlive
iran@iran:/media/texlive$ dir
archive README
install-tl rsync
install-tl-advanced.bat install-tl.bat tlpkg
install-tl-unx.tar.gz update-tlmgr-r23180.exe
install-tl-unx.tar.gz.sha256 update-tlmgr-r23180.exe.sha256
install-tl.zip update-tlmgr-r23180.sh
install-tl.zip.sha256 update-tlmgr-r23180.sh.sha256
```

همانطور که می‌بینید فایلی با نام install-tl هست. برای اجرای آن، دستور زیر را بزنید.

```
sudo perl install-tl
```

پیغام زیر را می‌گیرید.

```
[sudo] password for iran:
```

چون بصورت sudo هست، پسورد کاربر جاری را از شما می‌خواهد. وارد کنید و دکمه Enter را بزنید.
پیغام منوهای زیر ظاهر می‌شود.

```
<O> options:
  [ ] use letter size instead of A4 by default
  [X] allow execution of restricted list of programs via \write18
  [X] create all format files
  [X] install macro/font doc tree
  [X] install macro/font source tree
  [X] after install, use tlnet on CTAN for package updates

```

```
 <V> set up for portable installation

Actions:
 <I> start installation to hard disk
 <H> help
 <Q> quit

Enter command:
```

حرف O (اُ لاتین) را بزنید تا وارد قسمت Options شوید.

حرف L را بزنید تا symlinkها ایجاد شوند.

با این کار symlinkها ایجاد می‌شوند و نیازی به اضافه کردن‌شان به path سیستم نیست.

۳ تا اینتر بزنید تا مسیرهایی که پیشنهاد می‌دهد تأیید شوند. می‌توانید تغییر دهید، ولی پیشنهاد نمی‌شود.

حرف Y را بزنید تا بارگیری به‌روزرسانی‌های بسته‌ها بعد اتمام نصب انجام نشود. (به‌دلیل ایجاد مشکل احتمالی پیشنهاد نمی‌شود. مگر اینکه سرعت اینترنت عالی داشته باشید. پیشنهاد می‌شود بعد اتمام نصب، این کار را خودتان به جای استفاده از این گزینه، انجام دهید. یا بهتر از آن، مخزن تک‌لایو را بروزرسانی کنید و از روی آن نصب کنید.)حرفR را بزنید که به منوی اصلی برگردید.حرفI(آی لاتین) را زدم که نصب شروع بشه.بعد از اتمام نصب، این پیغام زیر را داد:

```
Most importantly, add /usr/local/texlive/2011/bin/i386-linux
 to your PATH for current and future sessions.

 Welcome to TeX Live!
Logfile: /usr/local/texlive/2011/install-tl.log
iran@iran:/media/texlive$
```

همان‌طور که می‌بینید، خطایی در مورد نصب نداده است و پیغام Wellcome to TeX Live داده است.

۳.۱.۱ نصب در مکینتاش

برای نصب تک‌لایو در مکینتاش، در Terminal بزنید:

```
sudo ./install-tl.bat
```

قبل شروع فرآیند نصب، symlink ها را در قسمت options فعال کنید. یعنی بعد زدن دستور بالا، و قبل هر کاری دیگر، در پنجرهٔ ترمینال به‌ترتیب بزنید:

ابتدا O سپس Y و در آخرR

۲.۱ نصب ویرایشگر

شما می‌توانید فایل LaTeX خود را در هر ویرایشگری به مانند یک Notepad ساده بنویسید، و سپس با بازکردن یک cmd در ویندوز و یا Terminal در لینوکس، کامپایلر مورد نظر را بر روی فایل خود اجرا کنید. به عنوان مثال فایلی به نام sample.tex با محتوای زیر را در نظر بگیرید.

```
\documentclass{report}
\usepackage{xepersian}
\settextfont{XB Niloofar}
 \begin{document}
سلام
\end{document}
```

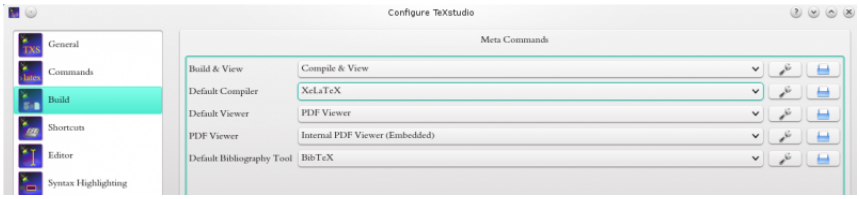
برای کامپایل این فایل کافی است که یک cmd یا Terminal در مسیر این فایل باز کنید و کامپایلر XeLaTeX در آن تایپ کنید.

```
xelatex sample.tex
```

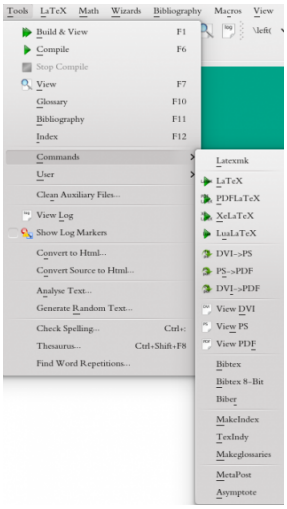
البته در اکثر ویرایشگرهای LaTeX به مانند TeXMaker TeXStudio و ... امکاناتی تعبیه شده است که در همان ویرایشگر می‌توانید کامپایل مورد نظر را انجام دهید. پیش‌فرض کامپایل برخی از این ویرایشگرها pdfLaTeX است. مسأله‌ای که وجود دارد این است که برای استفاده از بسته XePersian می‌بایست کامپایل XeLaTeX بر روی فایل خود انجام دهید. در این نوشتار می‌خواهیم این موضوع را مطرح کنیم که چگونه تنظیم پیش‌فرض کامپایلر این ویرایشگرها را تغییر دهیم.

ویرایشگر TeXStudio

از منوی option، گزینه Configure TexStudio را انتخاب کنید. از پنجره‌ای که برای شما باز می‌شود، قسمت Build را برگزینید. در قسمت Build از گزینه Default Compiler کامپایلر مورد نظر خود را انتخاب کنید. البته

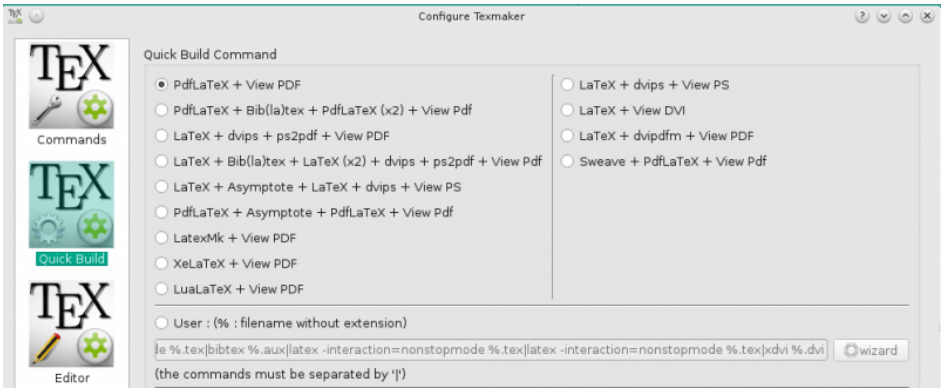


دقت کنید که با این کار شما کامپایلر پیش‌فرض را کلا تغییر می‌دهید. اما ممکن است که شما فقط بخواهید کامپایلر پیش‌فرض بر روی XeLaTeX باشد، اما اکنون بنا به دلیلی بخواهید دوباره pdflatex کامپایل کنید، نیازی نیست کامپایلر پیش‌فرض را دوباره تغییر دهید. برای این‌کار از منوی Tools قسمت Command می‌توانید کامپایلر دلخواه خود را انتخاب کنید.

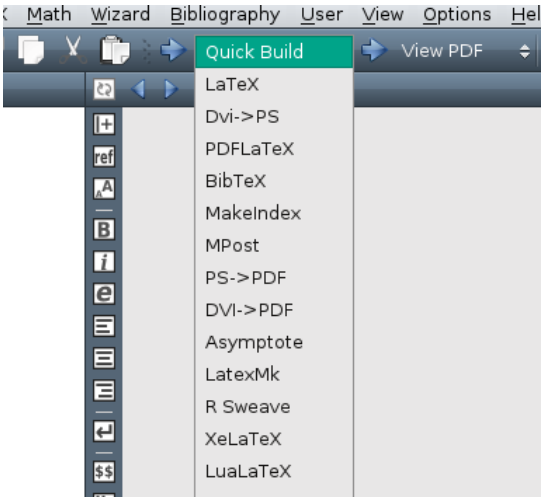


ویراشگر TeXmaker

در ویرایشگر TeXmaker نیز از منوی option گزینه Configure TeXmaker را انتخاب کنید. به قسمت Quick Build بروید. در آن‌جا می‌توانید کامپایلر مورد نظر خود را انتخاب کنید. البته دقت کنید که با این کار شما



تنظیم Quick Build را عوض می‌کنید. در صفحه اصلی این ویرایشگر شما علاوه بر انتخاب Quick Build می‌توانید کامپایلر مورد نظر خود را به صورت دستی نیز انتخاب کنید.



در هر ادیتوری می‌توان کدهای لاتک را نوشت اما ادیتورهایی هستند که به صورت گرافیکی نوشتن در محیط لاتک را آسان می‌کنند. یکی از بهترین این ادیتورها kile است که می توانید از https://kile.sourceforge.io/download.php نسخه مطلوب را برای سیستم عامل ویندوز و یا کد منبع آن را برای سیستم عامل لینوکس دانلود کنید. همچنین با استفاده از دستور زیر در لینوکس ابونتو یا مینت می‌توانید آن را نصب نمایید. تنظیمات در ان ادیتورها نیز مشابه بالاست.

```
sudo apt-get update
sudo apt-get install kile
```

ادیتورهای زیادی هستند که از لاتک برای نوشتن پشتیبانی می‌کنند منتهی برای زبان فارسی شاید مشکلاتی ایجاد کنند. بعد از نصب TeXLive و ادیتور می‌توانید نوشتن را شروع کنید.

۳.۱ ساختار فایل‌های لاتک

هر فایل لاتک از سه بخش اصلی تشکیل می‌شود.

```
%document type
\documentclass[11pt,twoside,a4paper]{article}
%preiamble
\usepackage{xepersian}
\settextfont{XB Niloofar}
%main text
 \begin{document}
سلام
\end{document}
```

بخش اول نوع سند را مشخص می‌کند. نوع سند می‌تواند مقاله،کتاب ، نامه و یا گزارش باشد(article, report, book, letter). که این کلاسها به صورت پیشفرض در لاتک قرار دارند که همراه با آن نصب می شوند. برخی کلاسهای دیگر پیشفرض نیز در زیر آمده است. کلاسهای مختلفی را می‌توان در اینترنت پیدا کرد. کلاس این پایان‌نامه که iut-thesis.cls است را در پوشه آن می توانید بیابید.

در همین قسمت می توان اندازه فونت پیشفرض، اندازه کاغذ و برخی ماهیت‌های سند را نیز تنظیم نمود. این ماهیت‌ها از قرار زیراند.

بخش دوَم preiamble است که محل واردکردن بسته‌های مختلف لاتک برای منظور های مختلف است. همچنین تنظیمات دیگر مربوط به بسته‌ها و یا تعریف متغییرها در این قسمت وارد می شود. از آنجایی که ما از بسته xepersian برای نوشتن فارسی استفاده می‌کنیم این بسته باید آخرین بسته‌ای باشد که فراخوانی می‌شود. هر بسته‌ای برای خود و چگونگی استفاده از آن روی اینترنت مستندات مربوط به خود را دارد.

بخش سوَم مربوط به نوشتار متن و ساختار آن است. در این بخش ما از دستورات مختلف لاتک برای نوشتن سندی که می خواهیم به دست آوریم استفاده می کنیم. از فرامینی که بسته‌های لاتک در اختیار ما قرار می دهند بهره می

article	For articles in scientific journals, presentations, short reports, program documentation, invitations, ...
IEEEtran	For articles with the IEEE Transactions format.
proc	A class for proceedings based on the article class.
report	For longer reports containing several chapters, small books, thesis, ...
book	For real books.
slides	For slides. The class uses big sans serif letters.
memoir	For changing sensibly the output of the document. It is based on the book class, but you can create any kind of document with it
letter	For writing letters.
beamer	For writing presentations (see LaTeX/Presentations).

جدول ۱.۱ – جدول برخی کلاسهای در لاتک

10pt, 11pt, 12pt	Sets the size of the main font in the document. If no option is specified, 10pt is assumed.
a4paper, letterpaper,...	Defines the paper size. The default size is letterpaper; However, many European distributions of TeX now come pre-set for A4, not Letter, and this is also true of all distributions of pdfLaTeX. Besides that, a5paper, b5paper, executivepaper, and legalpaper can be specified.
fleqn	Typesets displayed formulas left-aligned instead of centered.
leqno	Places the numbering of formulas on the left hand side instead of the right.
titlepage, notitlepage	Specifies whether a new page should be started after the document title or not. The article class does not start a new page by default, while report and book do.
twocolumn	Instructs LaTeX to typeset the document in two columns instead of one.
twoside, oneside	Specifies whether double or single sided output should be generated. The classes article and report are single sided and the book class is double sided by default. Note that this option concerns the style of the document only. The option twoside does not tell the printer you use that it should actually make a two-sided printout.
landscape	Changes the layout of the document to print in landscape mode.
openright, openany	Makes chapters begin either only on right hand pages or on the next page available. This does not work with the article class, as it does not know about chapters. The report class by default starts chapters on the next page available and the book class starts them on right hand pages.
draft	makes LaTeX indicate hyphenation and justification problems with a small square in the right-hand margin of the problem line so they can be located quickly by a human. It also suppresses the inclusion of images and shows only a frame where they would normally occur.

جدول ۲.۱ – جدول برخی تنظیمات کلاسهای در لاتک[۱]

گیریم تا به وسیله آنها فرمولها، تصاویر،زیرنویس‌ها، جداول، فصول، مراجع و... را بنویسیم. در فصل آینده دستوراتی را که در این بخش استفاده می کنیم و همچنین بسته‌های مرتبط با آنها را معرفی می‌نماییم.

فصل ۲

فونت و نویسه‌ها

۱.۲ انواع فونت‌ها در رایانه

در حالت کلی تمامی فونت هایی که شما با آن سروکار دارید، در سه دسته کلی طبقه‌بندی می‌گردد.

فونت‌های bitmap: فونت‌های Bitmap به صورت ماتریسی از نقاط بیان می‌شوند. به همین علت این فونت‌ها به سخت افزار سیستم وابسته هستند و فقط در یک resolution معین به کار می‌آیند. یک bitmap روی صفحه DPI۷۵ با وجود یک چاپگر DPI۱۲۰۰ همچنان به صورت DPI۷۵ خواهد بود. فونت‌های bitmap صفحه نمایش معمولاً دارای پسوند bdf یا pcf می‌باشند. این فونت‌ها اغلب در پنجره‌ها، کنسول‌ها و ویرایشگرهای متنی کاربرد دارند، زیرا در این محلها عدم مقیاس پذیری مسئله چندان مهمی نیست.

فونت‌های Outline: به این دسته از فونت‌ها اصطلاحا فونت‌های برداری (vector font) نیز گفته می‌شود. در این دسته از فونت‌ها، توصیف کلی فونت به صورت یکسری قواعد برداری و روابط ریاضیاتی بیان می‌شود، بدین‌سان این فونت‌ها تا هر اندازه دلخواهی توانایی مقیاس‌پذیر بودن دارند. برخی از انواع فونت های این دسته به شرح زیر است.

- Post script Type 1
- Post script Type 3
- True Type
- Open Type

فونت‌ها نوعStroke: این دسته از فونت ها از یکسری خطوط به همراه توصیفی از نحوه چیدمان خطوط در کنار یکدیگر، تشکیل شده است. فونت های metafontدر این دسته جای می‌گیرند

۲.۲ فونت در xepersian

در xepersian شما می توانید سه دسته فونت کلی تعریف کنید. این سه دسته عبارت اند از:

- فونت مخصوص عبارات فارسی که با دستور settextfont تعیین می شود، به عنوان مثال:

```
\settextfont{B Nazanin}
```

فونت برای عبارات انگلیسی. اولا دقت کنید که برای این که xepersian بتواند بفهمد که کلمه شما انگلیسی است، بدین‌سان شما باید کلمه و یا عبارت خود را درون دستور \lr{} قرار دهید، مثلا:

```
\lr{English Words}
```

و توسط دستور setlatintextfont نیز یک فونت انگلیسی تعریف کنید. مانند آن چه که در ادامه آمده است.

```
\setlatintextfont{Times New Roman}
```

- در ضمن شما می توانید یک فونت هم برای اعداد و ارقام در فرمول های ریاضی تعریف کنید. به صورت زیر:

```
\setdigitfont{XB Zar}
```

دقت کنید که به صورت پیش فرض اعداد و ارقام به صورت فارسی در فرمول ها در لاتک نوشته می شود، اگر بخواهد اعداد و ارقام به صورت انگلیسی در فرمول ها ظاهر شوند، کافی است دستور زیر را بنویسید:

```
\DefaultMathsDigits
```

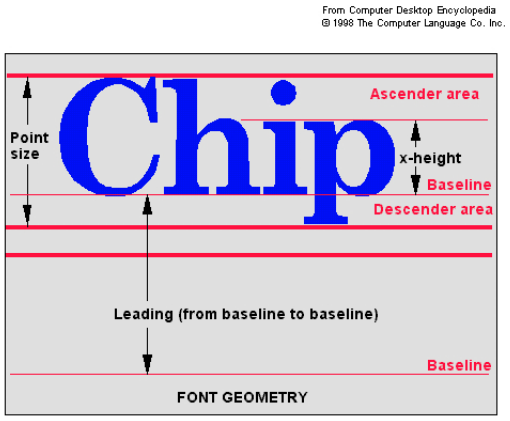
در مورد نحوه تنظیم اندازه فونت در بخش بعدی سخن به میان خواهد آمد.

۳.۲ اندازه فونت

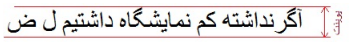
قبل از این‌که وارد بحث اصلی شویم، ابتدا باید بفهمیم که منظور از اندازه فونت چیست؟ در یک تعریف کلی به تفاوت ارتفاع بین بلندترین حرف و کوتاهترین حرف، اندازه فونت گویند. اگر تاکنون با word کار کرده اید، حتما فونت ها را با معیاری به نام اندازه می شناسید. این معیار اندازه با معیار اندازه بر حسب point در Latex متفاوت است. البته این تفاوت برای همه فونت ها یکسان نیست، لذا کار کمی پیچیده می شود. اما اگر در ادامه نیز همراهی کنید، فکر کنم به خوبی می توانید موضوع را متوجه شوید. فرض کنید که می‌خواهید نوشتار خود را با اندازه فونت ۱۴ در Latex تایپ کنید. برای این کار باید چند نکته و گام را در نظر بگیرید.

گام نخست

در ابتدا باید یک فونت پایه برای نوشتار خود انتخاب کنید. در کل سه اندازه استاندارد برای نوشتارهای رسمی وجود دارد:



شکل ۱.۲ – تعریف اندازه فونت برای فونت های انگلیسی



شکل ۲.۲ – تعریف اندازه فونت برای فونت های انگلیسی

- اندازه ۱۰pt که اندازه کوچک نامیده شده (که فونت‌اندازه پیشفرض تک می‌باشد.)
- اندازه ۱۱pt که اندازه متوسط نامیده می‌شود.
- اندازه ۱۲pt که اندازه بزرگ محصوب می‌شود. برای تنظیم اندازه فونت پایه در lrLatex چندین روش وجود دارد، که ما در ادامه به دو مورد از آن‌ها اشاره می‌کنیم.
- می توانید این مورد را در قسمت اختیاری documentclass بنویسید. مانند:

```
1 \documentclass[12pt]{report}
```

با این کار شما اندازه فونت پایه را ۱۲pt گذاشتید.

- اگر دارید فایل استایل می نویسید، در دستور loadClass عدد ۱۲pt را بگذارید.

```
1 \LoadClass[12pt]{.....}
```

- در اکثر استایل‌های پیش‌فرض Latex به مانند letter article book report و ... اندازه پیش‌فرض ۱۰pt است

گام دوم

اکنون شما می‌توانید با دو روش اندازه فونت خود را تعیین کنید. در روش اول، از دستور Scale در تعریف فونت استفاده می‌گردد. به عنوان مثال:

```
1 \settextfont[Scale=1.4]{XB Niloofar}
2 \setlatintextfont[Scale=1.3]{Times New Roman}
```

برای مثال با اندازه فونت پایه pt۱۰ و Scale=۱.۲ اندازه فونت برابر با pt۱۲ خواهد شد، و یا برای اندازه فونت پایه pt۱۲ و Scale=1.2 اندازه فونت برابر با ۴.۱۴ خواهد شد. روش دوم مسستقل از اندازه فونت پایه است، در این روش در هرجایی از متن که می‌خواهید از دستور fontsize به صورت زیر استفاده کنید.

```
\fontsize{x}{y}\selectfont
```

در این روش از هر جایی از متن که دستورات فوق زده شود، اندازه فونت به مقدار x تنظیم خواهد شد و اندازه فاصله خط کرسی به y. البته هر جایی از متن که خواستید می‌توانید این اندازه را تغییر دهید به عنوان مثال، کد زیر را در نظر بگیرید.

```
\documentclass[10pt]{article}
\usepackage{xepersian}
\settextfont{XB Niloofar}

\begin{document}
در حالتی که اندازه‌ای تعریف نشده، نوشتار با اندازه فونت پایه چاپ می‌شود.
\fontsize{13}{14}\selectfont
از این قسمت به بعد اندازه فونت ۱۳ خواهد شد.
\fontsize{16}{17}\selectfont
از این قسمت به بعد اندازه فونت ۱۶ خواهد شد.
\end{document}
```

خروجی در شکل زیر نشان داده شده است. در کل بهتر است از روش fontsize برای تغییر اندازه فونت به جای

در حالتی که اندازه‌ای تعریف نشده، نوشتار با اندازه فونت پایه چاپ می‌شود.
از این قسمت به بعد اندازه فونت ۱۳ خواهد شد.
از این قسمت به بعد اندازه فونت ۱۶ خواهد شد.

شکل ۳.۲ – مثالی از تغییر اندازه فونت با دستور fontsize

روش Scale استفاده کنید. دلیلش هم این است که (۱) کیفیت در مقیاس‌های بزرگ پایین می‌آید زیرا که شما تنها ابعاد را بزرگ یا کوچک می‌کنید (۲) هیچ کنترلی روی فاصله خط کرسی وجود ندارد

گام سوم

البته قضیه بدین‌جا ختم نمی‌شود. برطبق این پست این موضوع در فونت‌های فارسی ظاهرا رعایت نمی‌شود. حروف فارسی به گونه‌ای هستند که این ارتفاع در آنها از حروف انگلیسی بیشتر است. بنابراین چنانچه ی متن فارسی با فونت ۱۲ داشته باشیم و در همان متن از فونت ۱۲ انگلیسی هم استفاده کنیم، حروف فارسی کمی کوچکتر به نظر می‌رسند. به همین دلیل در برخی از فونتها به طور عمد سایز فونت‌های فارسی را الکی بزرگ کردند تا از لحاظ ظاهری شل آنها با فونتهای انگلیسی همخوان باشد. این کار باعث به هم ریختن استاندارد شده است. در همان پست یاد شده کدهایی قرار داده شده است که شما می‌توانید نسبت دقیق را بدست آورید.

۴.۲ فونت فارسی و انگلیسی

در نرم افزار word وقتی شما از یک فونت به عنوان نمونه B Nazanin استفاده می کنید، word در هنگام مواجه با کلمات انگلیسی، این کلمات را به یک فونت پیش فرض تبدیل می کند. چرا که اغلب فونت هایی که ما با آن ها کار می کنیم، تنها می توانند زبان فارسی و یا انگلیسی را پشتیبانی کنند. مثلا B Nazanin فقط برای پشتیبانی از زبان فارسی است و نه برای انگلیسی. اما در LATEX این گونه نیست. برای حل این مشکل دو راه حل دارید:

۱. از فونت‌هایی استفاده کنید که هم فارسی را پشتیبانی می کنند و هم انگلیسی را، به مانند فونت‌های سری XB مثل XB Niloofar. برای دانلود فونت‌های از این قبیل به پیوند X Series fonts مراجعه کنید.

۲. در این روش، می بایست عبارات انگلیسی در متن فارسی را در داخل یک {}\lr قرار دهید تا فهمیده شود که این عبارت باید با فونت انگلیسی نوشته شود. در این روش عبارت‌های انگلیسی با فونت انگلیسی در متن ظاهر می‌گردد.

- در کل به نظر من راه حل دوم بهتر است.
- در روش اوّل، نیازی نیست که کلمات انگلیسی خود را درون دستور {}\lr قرار دهید.

۵.۲ نحوه تعریف فونت های دیگر

توسط دستورات defpersianfont و deflatinfont به ترتیب می توان یکسری فونت فارسی و انگلیسی دیگر تعریف کرد که در جاهای دیگر متن بتوان از آن استفاده کرد. مثلا در ادامه ما دو فونت تعریف کرده ایم:

```
1 \defpersianfont\myFafont[Scale=.8]{XM Traffic}
2 \deflatinfont\myEnfont[Scale=.9]{Adobe Arabic}
```

هرگاه خواستیم یک عبارت از متن ما به صورت فونت های یادشده نوشته شود کافی است به صورت زیر عمل کنیم:

```
1 \myFafont{.................}
```

که به جای نقطه چین کافی است عبارتی را که می خواهیم به صورت آن فونت در آید را قرار دهیم.

۶.۲ فونت‌های مورد نیاز قالب iut-thesis

تمامی فونت‌های مورد نیاز این قالب در پوشه fonts قرارد دارد که باید آنها را نصب کنید. نصب فونت در لینوکس با قرار دادن پوشه‌ای حاوی فونت‌ها با نام fonts. در پوشه خانگی و یک بار لاگین مجدد انجام می‌شود. در ویندوز نیز از طریق کنترل پانل و بخش فونت با کپی کردن فونت‌ها این کار صورت می پذیرد.

فصل ۳

نمونه‌ها و ابزارها

۱.۳ مقدمه ای بر استفاده از بسته‌ها

در این بخش به طور خلاصه بیان می‌کنیم که چطور می‌توان شکل وارد نمود و یا نمونه کد و جدول و ... را به فایل مطلوبمان اضافه کرد. همانطور که قبلا نیز اشاره شد در لاتک با استفاده از بسته‌های مختلف می توان از ابزارهایی استفاده کرد که با آن اشکال، جداول، نمودارها و به طور کلی اجزای یک سند را شکل داد. این ابزارها که به صورت بسته‌های لاتک فراخوانی می‌شوند و از ابزارها آنها می توان استفاده کرد. در زیر برخی از بسته‌های لاتک و امکاناتی را که در اختیار قرار می دهند آورده‌ایم.در زمان نوشتن این گفتار تعداد بسته‌های رسمی لاتک بیش از ۵۴۰۰ و بسته‌های غیر رسمی بیش از ۲۵۰۰ عدد است.

amsmath	It contains the advanced math extensions for LaTeX. The complete documentation should be in your LaTeX distribution; the file is called amsdoc, and can be dvi or pdf. For more information, see the chapter about Mathematics. Successed by mathtools package described below.
amssymb	It adds new symbols in to be used in math mode.
amsthm	It introduces the proof environment and the \theoremstyle command. For more information see the Theorems section.
array	It extends the possibility of LaTeX to handle tables, fixing some bugs and adding new features. Using it, you can create very complicated and customized tables. For more information, see the Tables section.

babel	It provides the internationalization of LaTeX. It has to be loaded in any document, and you have to give as an option the main language you are going to use in the document. For more information see the Internationalization section.
biblatex	Advanced bibliography handling. It is the package to use for writing a thesis.
bm	Allows use of bold greek letters in math mode using the\bm{...} command. This supersedes the amsbsy package.
booktabs	provides extra commands as well as behind-the-scenes optimisation for producing tables. Guidelines are given as to what constitutes a good table in the package documentation.
boxedminipage	It introduces the boxedminipage environment, that works exactly like minipage but adds a frame around it.
caption	Allows customization of appearance and placement of captions for figures, tables, etc.
cleveref	Enhances LaTeX's cross-referencing features, allowing the format of references to be determined automatically according to the type of reference.
dcolumn	The package defines a new "D" column format in tabular environments for aligning the numbers in columns on the decimal point.
enumitem	Adds support for arbitrarily-deep nested lists (useful for outlines). See List Structures.
epstopdf	Provides and option to convert EPS images to PDF and include them with \includegraphics{}.
esint	Adds additional integral symbols, for integrals over squares, clockwise integrals over sets, etc.
eucal	Other mathematical symbols.
fancyhdr	To change header and footer of any page of the document. It is described in the Page Layout section.

float	Improves the interface for defining floating objects such as figures and tables, introduces new floating objects types (boxed, ruled, plaintop) and provides an ability to define custom ones.
fontenc	To choose the font encoding of the output text. You might need it if you are writing documents in a language other than English. Check in the Fonts section.
gensymb	Provides generic commands \degree, \celsius, \perthousand, \micro and \ohm which work both in text and maths mode.
geometry	For easy management of document margins and the document page size. See Page Layout.
glossaries	For creation of glossaries and list of acronyms. For more information, see the relevant chapter.
graphicx	Allows you to insert graphic files within a document.
grffile	Improves the file name processing of graphic/graphicx packages to support a larger range of file names (spaces, multiple dots, etc.).
hyperref	It gives LaTeX the possibility to manage links within the document or to any URL when you compile in PDF. For more information, see the relevant section.
indentfirst	Once loaded, the beginning of any chapter/section is indented by the usual paragraph indentation.
inputenc	To choose the encoding of the input text. You might need it if you are writing documents in a language other than English. Check in the Special Characters section.
latexsym	Other mathematical symbols.
listings	To insert programming code within the document. Many languages are supported and the output can be customized. For more information, see the Source Code Listings.
longtable	Allows you to write tables that continue to the next page. You can also define a header and a footer which will be shown on every page the table occupies, for example cont. from last page.

mathptmx	Sets the default font of the entire document (including math formulae) to Times New Roman, which is a more familiar font, and useful in saving space when fighting against page limits.
mathrsfs	Other mathematical symbols.
mathtools	Successor of amsmath, some additional functionality, some bugs fixed.
mhchem	allows you to easily type chemical species and equations. It automatically formats chemical species so you don't have to use subscript commands. It also Allows you to draw chemical formulas.
microtype	It provides an improvement to LaTeX's default typographic extensions, improvements in such areas as character protrusion and font expansion, interword spacing and additional kerning, and hyphenatable letter-spacing
multicol	provides the multicols environment which typesets text into multiple columns.
natbib	Gives additional citation options and styles. Often used for journal submission.
pdfpages	This package simplifies the insertion of external multi-page PDF or PS documents.
rotating	It lets you rotate any kind of object. It is particularly useful for rotating tables. For more information, see the relevant section.
setspace	Lets you change line spacing, e.g. provides the command for making double spaced documents. For more information, see the relevant section.

showkeys	A useful package related to referencing. If you wish to reference an image or formula, you have to give it a name using \label{…} and then you can recall it using \ref{…}. When you compile the document these will be replaced only with numbers, and you can't know which label you had used unless you take a look at the source. If you have loaded the showkeys package, you will see the label just next or above the relevant number in the compiled version. An example of a reference to a section is Latex showkeys example.png. This way you can easily keep track of the labels you add or use, simply looking at the preview (both dvi or pdf). Just before the final version, remove it.
showidx	It prints out all index entries in the left margin of the text. This is quite useful for proofreading a document and verifying the index. For more information, see the Indexing section.
subfiles	The "root" and "child" document can be compiled at the same time without making changes to the "child" document. For more information, see the Modular Documents section.
subcaption	It allows to define multiple floats (figures, tables) within one environment giving individual captions and labels in the form 1a, 1b.
textcomp	Provides extra symbols, e.g. arrows like \textrightarrow, various currencies (\texteuro,...), things like \textcelsius and many others.
theorem	You can change the style of newly defined theorems. For more information see the Theorems section.
todonotes	Lets you insert notes of stuff to do with the syntax \todo{Add details.}.
siunitx	Helps you typeset of SI-units correctly. For example \SI{12}{\mega\hertz}. Automatically handles the correct spacing between the number and the unit. Note that even non-SI-units are set, like dB, rad, ...
ulem	It allows to underline text (either with straight or wavy line). Few examples of usage are added to the Fonts chapter.

url	It defines the \url{...} command. URLs often contain special character such as _´and &´, in order to write them you should escape them inserting a backslash, but if you write them as an argument of \url{...}, you don't need to escape any special character and it will take care of proper formatting for you. If you are using hyperref, you don't need to load url because it already provides the \url{...} command.
verbatim	It improves the verbatim environment, fixing some bugs. Moreover, it provides the comment environment, that lets you add multiple-line comments or easily comment out big parts of the code.
xcolor	It adds support for colored text. For more information, see the relevant section.
xypic	It is used to create trees, graphs, (commutative) diagrams, and similar things. See Xy-pic.

۲.۳ فرمولها

فرمول‌نویسی و شماره گذاری فرمول‌ها در لاتک بسیار ساده است . کد زیر

```
\begin{equation}\label{eq:1.2.2}
\bar{r}_{r\mathbf{R}}=\langle{\mathbf{R}n}|r|\mathbf{R}n\rangle
\end{equation}
```

خروجی زیر را می دهد.

$$\bar{r}_{r\mathbf{R}} = \langle \mathbf{R}n|r|\mathbf{R}n\rangle \qquad (۳-۱)$$

همانطور که دیده می‌شود برای نوشتن عبارات در فرمول‌ها از دستور زبان خاصی استفاده می شود که IDE ها معمولا این موارد را به صورت گرافیکی در اختیار قرار می دهند و افراد با استفاده از آنها به راحتی آنها را در کد لاتک خود درج می کنند. کلید \label{eq:1.2.2} چاپ نمی‌شود و فقط برای ارجاع به فرمول است عبارت eq:1.2.2 یک عبارت اختیاری است که شما می توانید به دلخواه آن را تنظیم کنید و هر جایی که می‌خواهید به فرمول فوق ارجاع دهید با استفاده از \ref{eq:1.2.2} می‌توانید این ارجاع را وارد کنید که در متن به شکل ۳-۱ چاپ می شود. مثلا می گوییم در فرمول ۳-۱ ما یک معادله گفتیم.

فرمول‌ها می توانند چند خط باشند

```
\begin{gather}
```

```
\psi _{n\mathbf{k}} ({\bf r}) = u_{n\mathbf{k}} ({\bf r}) \exp{(i\mathbf{k.r})} \\
 u_\mathbf{k}({\bf r})=u_\mathbf{k}({\bf r}+\mathbf{R})
\end{gather}
```

که می شود

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp{(i\mathbf{k}.\mathbf{r})} \tag{۳-۲}$$

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \tag{۳-۳}$$

ویا هم خط شده باشند

```
\begin{align}\label{eq2}
w_n({\bf r}-\mathbf{R})=\left|\mathit{\mathbf{R}n}\right\rangle &=\frac {V}{(2\pi )^3}\int
_{\mathit{BZ}}\mathit{d\mathbf{k}}\exp{(-\mathit{i\mathbf{k}.\mathbf{R}})}\left|\psi \right\rangle \\
&= \frac V{(2\pi )^3}\int
_{\mathit{BZ}}\mathit{d\mathbf{k}}\exp{(-\mathit{i\mathbf{k}.\mathbf{R}})}u_{\mathit{n\mathbf{k}}}({\↩
    bf r})e^{\mathit{i\mathbf{k.r}}}\nonumber
\end{align}
```

که می‌شود

$$\begin{aligned} w_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = |\mathbf{R}n\rangle &= \frac{V}{(۲\pi)^۳}\int_{BZ} d\mathbf{k} \exp{(-i\mathbf{k}.\mathbf{R})}\,|\psi\rangle \\ &= \frac{V}{(۲\pi)^۳}\int_{BZ} d\mathbf{k} \exp{(-i\mathbf{k}.\mathbf{R})} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \end{aligned} \tag{۳-۴}$$

که محل هم خط سازی را با علامت & مشخص می کنیم . گاهی نیاز است در فرمول ما شماره فرمول نداشته باشیم. برای این موارد از \nonumber

چنانچه بخواهیم عبارتی مانند ϵ یا $\bar{r}_{r\mathbf{R}} = \langle \mathbf{R}n|r|\mathbf{R}n\rangle$ که عباراتی ریاضی هستند در وسط متن بنویسیم آنها را بین دو $ قرار می دهیم. به عبارتی دیگر متن

```
این یک نمونه فرمول در وسط متن $ \bar{r}_{r\mathbf{R}}$ است
```

خروجی به شکل : این یک نمونه فرمول در وسط متن $\bar{r}_{r\mathbf{R}}$ است.

ماتریس هم به شکل زیر نوشته می شود

```
\begin{equation}
 S= \begin{pmatrix}
     S_{cc} & S_{cv} \\
     S_{vc} & S_{vv}\\
     \end{pmatrix}
\end{equation}
```

که می شود

$$S = \begin{pmatrix} S_{cc} & S_{cv} \\ S_{vc} & S_{vv} \end{pmatrix} \tag{۳-۵}$$

نمونه‌ای از یک فرمول طولانی که در چند خط آمده است به شکل زیر است.

```
\begin{align}
\langle {\bf s}^{\prime}L^{\prime} | H | R{\bf s}L\rangle= & \langle {\bf s}^{\prime}L^{\prime}|-\frac{\Delta}{2} +\sum_{L_{1}} v_{{\bf s}^{\prime}L_1}(|{\bf r}-{\bf s}^{\prime}|) Y_{L_1}({\bf r}-{\bf s}^{\prime})|{\bf s}L\rangle \nonumber \\
+ & \sum_{L_{2}} v_{{\bf s}L_{2}}(|{\bf r}-R-{\bf s}) Y_{L_{2}}({\bf r}-R-{\bf s})|R{\bf s}L\rangle \nonumber \\
+ & \langle {\bf s}^{\prime}L^{\prime} | \sum_{({\bf s}^{\prime\prime}\neq)R^{\prime\prime}+{\bf s}^{\prime\prime}(\neq R+{\bf s}) , L_{1} } v_{{\bf s}^{\prime\prime}L_1}(|{\bf r}-R^{\prime\prime}-{\bf s}^{\prime\prime} |) Y_{L_{1}}({\bf r}-R^{\prime\prime}-{\bf s}^{\prime\prime}) | {\bf s}L\rangle
\end{align}
```

خروجی آن نیز به شکل

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{s}'L'|H|R\mathbf{s}L\rangle =& \langle \mathbf{s}'L'| - \frac{\Delta}{2} + \sum_{L_1} v_{\mathbf{s}'L_1}(|\mathbf{r}-\mathbf{s}'|)Y_{L_1}(\mathbf{r}-\mathbf{s}')|\mathbf{s}L\rangle \\ &+ \sum_{L_2} v_{\mathbf{s}L_2}(|\mathbf{r}-R-\mathbf{s})Y_{L_2}(\mathbf{r}-R-\mathbf{s})|R\mathbf{s}L\rangle \\ &+ \langle \mathbf{s}'L'| \sum_{(\mathbf{s}''\neq)R''+\mathbf{s}''(\neq R+\mathbf{s}),L_1} v_{\mathbf{s}''L_1}(|\mathbf{r}-R''-\mathbf{s}''|)Y_{L_1}(\mathbf{r}-R''-\mathbf{s}'')|\mathbf{s}L\rangle \end{aligned} \tag{۳-۶}$$

می توانید در آدرس زیر فرمولها و نویسه‌های ریاضی بیشتری را ببینید.

https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Mathematics

۳.۳ درج اشکال و تصاویر

برای درج یک شکل در متن می‌توانیم از دستور زیر استفاده کنیم:

```
\includegraphics[scale=1]{fig-name}
```

که در آن پارامتر اختیاری scale اندازه‌ی شکل را تعیین می‌کند و fig-name نام شکلی است که می‌خواهیم در سند قرار دهیم. لطفا توجه فرمایید که این شکل یا باید در کنار فایل اصلی قرار داده شود و یا مانند زیر مسیر کامل آن تعریف شده باشد:

```
\includegraphics[scale=1]{/hoem/user/Desktop/fig_name}
```

همچنین، می‌توان با استفاده از دستور زیر مسیر کلیه‌ی تصاویر را در یک پوشه تنظیم کرد:

```
\graphicspath{ {images/} }
```

که images نام پوشه‌ای است که کلیه تصاویر در آن قرار دارد.
توجه داشته باشید که با دستور بالا شکل مثل یک قسمت از متن تلقی می‌شود و چنانچه بخواهید مکان شکل شما به صورت شناور و پویا توسط لاتک تعیین شود می‌توانید آن را در داخل یک محیط figure قرار دهید.

```
\begin{figure}[...]
\centering
\caption{عنوان شکل}
\includegraphics[scale=1]{fig_name}
\end{figure}
```

به جای ... به عنوان پارامتر اختیاری figure می‌توانید یکی از حروف htbpH را قرار دهید یا یک رشته دلخواه از این مجموعه حروف که به ترتیب باعث می‌شوند که شکل در مکان دستور درج شکل ،(here) بالای صفحه دستور درج شکل ،(top) پایین صفحه دستور درج شکل ،(bottom) در صفحه مجزایی شامل اجزای شناور (page floats) of و حتما در همین‌جا حتی با ناتمام گذاشتن صفحه قبل (Here) قرار گیرد.
دستور centering باعث وسط‌چین شدن شکل می‌شود، دستور caption هم باعث می‌شود که عنوان به شکل اضافه شود. توجه داشته باشید که دستور caption را می‌توانید بعد از دستور فراخوانی شکل قرار دهید تا عنوان به پایین شکل اضافه شود.

۴.۳ مرجع‌دهی تصویر

چنانچه مایل باشید که تصویر مورد نظر را در متن ارجاع دهید باید از label استفاده نمود. به عنوان مثال به کد زیر توجه فرمایید:

```
\begin{figure}[h]
    \centering
    \includegraphics[width=0.25\textwidth]{mesh}
    \caption{a nice plot}
    \label{fig:latex-fig}
\end{figure}
```

این شکل به صورت زیر در متن ارجاع داده می‌شود:

همانگونه که در شکل \ref{fig:latex-fig} نمایش داده شده است برای ارجاع دادن تصویر در یک متن از lable استفاده می‌شود.

نتیجه به صورت زیر مشاهده می‌شود:

همانگونه که در شکل ۳ نمایش داده شده است برای ارجاع دادن تصویر در یک متن از lable استفاده می‌شود.

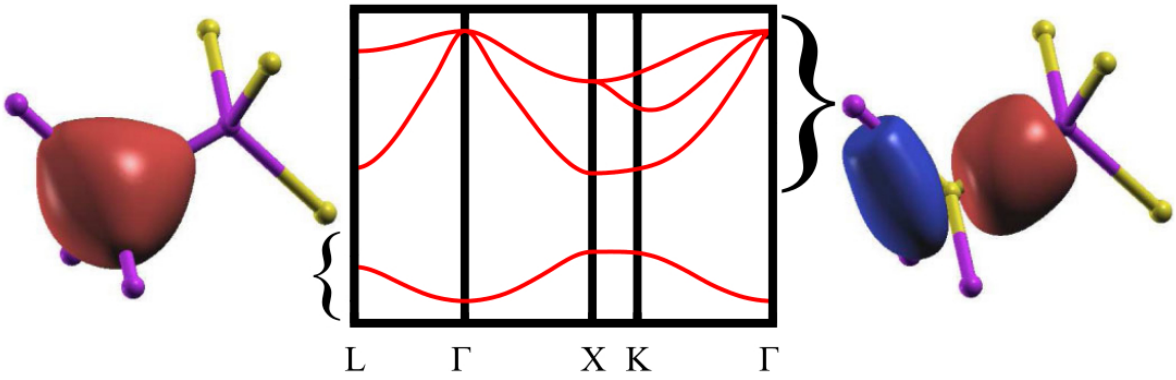
برای توضیحات بیشتر می توانید به لینکی که در زیر آمده است مراجعه کنید.

https://www.sharelatex.com/learn/Inserting_Images

https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Floats,_Figures_and_Captions

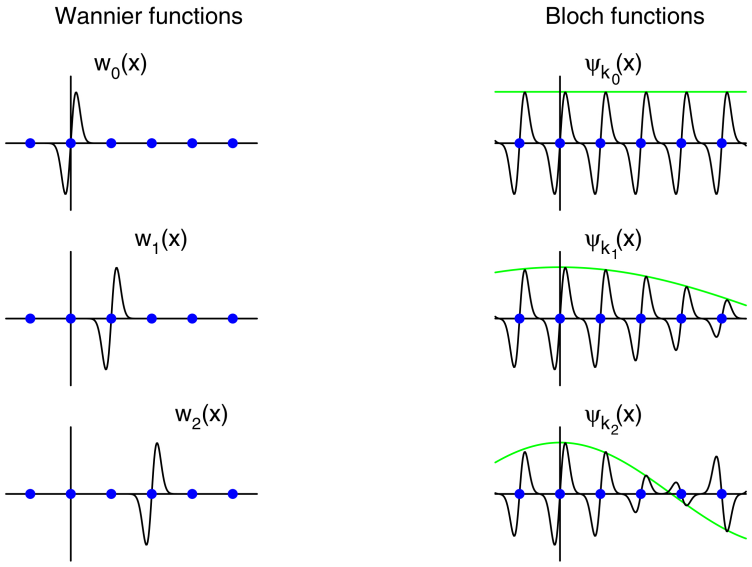
در ادامه چند نمونه شکل آمده است که می توانید کد منبع آنها را در فایل تک پایان‌نامه ببینید.

وقتی که تنها یک شکل را بخواهیم وارد کنیم که الگوی فوق به کار می‌رود.



شکل ۱.۳ – توابع وانییر بیشینه جایگزیده ساخته شده از نوار s یا سه نوار p در GaAs[۲]

نمونه شکل ۲.۳الف برای زمانی است که دو تصویر یا بیشتر کنار هم بخواهیم است.



(الف) – شکل سمت راست **(ب)** – شکل سمت چپ

شکل ۲.۳ – الف : توابع بلوخ متناظر با سه نقطه k مختلف در یک بعد در فضای واقعی که قسمت سبز رنگ، مربوط به پوش $e^{i\mathbf{k}r}$ است. ب : توابع وانیر جایگزیده که فضای متناظر با سمت چپ را تنیده است[۲]

شکل نمونه زیر وقتی است که بخواهیم زیرنویس تصویر را کنارنویس کنیم در این صورت از بسته SCfigure استفاده می کنیم.



شکل ۳.۳ – ایشان آقای لاپلاس است

۵.۳ انواع لیست درLaTeX

در این بخش تلاش میگردد انواع روش های ایجاد لیست در متن و نحوه استفاده از آنها بیان گردد. استفاده از لیست ها در LaTeX بسیار راحت میباشد. برای لیست هایی که نیاز به ترتیب خاص ندارند میتوان از محیط itemize و برای لیست های دارای ترتیب میتوان از محیط enumerate استفاده کرد. استفاده از این دو محیط نیاز به افزودن بسته خاصی ندارد. برای ایجاد لیست بر اساس عنوان نیز میتوان از محیط decription استفاده کرد. لازم به ذکر است که برای استفاده از این محیط لازم است بسته enumitem فراخوانی گردد.

۱.۵.۳ لیست بدون ترتیب

برای استفاده از محیط itemize میتوان از دستور زیر استفاده نمود.

```
1 \begin{itemize}[label=$\ast$]
2   \item یک
3   \item دو
4   \item سه
5 \end{itemize}
```

شایان ذکر است که آرگومان ورودی(در اینجا `[label=$\ast$]`) شکل مورد استفاده برای لیست بندی را مشخص میکند.این دستور خروجی به شکل زیر ایجاد میکند.

* یک
* دو
* سه

در صورتی که نیاز باشد نمادهای مورد استفاده در لیست تغییر کنند، میتوان بصورت زیر نمادها را تغییر داد.

```
\begin{itemize}
  \item[$-$]      دش
  \item[$\ast$] ستاره
  \item[$+$]      پلاس
\end{itemize}
```

که نتیجه خروجی به شکل زیر میباشد:

- دش
* ستاره
+ پلاس

۲.۵.۳ لیست های دارای ترتیب

برای ایجاد لیست دارای ترتیب میتوان از محیط enumerate به شکل زیر استفاده نمود.

```
\begin{enumerate}[label=\alph*)]
  \item یک
  \item دو
  \item سه
\end{enumerate}
```

آرگومان ورودی `[label=\alph*)]` شیوه ترتیب بندی را مشخص میکند. میتوان از دستور `[label=(\roman*)]` برای شماره گذاری با حروف یونانی و از دستور `[label=\arabic*)]` برای شماره گذاری با اعداد فارسی استفاده نمود. خروجی این دستور به شکل زیر میباشد.

الف) یک

ب) دو

ج) سه

در صورتی که در ایجاد لیست نیاز به زیرگروه نیز باشد. میتوان به شکل زیر این زیرگروهها را ایجاد کرد:

```
\begin{enumerate}[label=(\roman*)]
   \item یک
   \begin{enumerate}[label=(\arabic*)]
      \item دو
      \item سه
      \item چهار
   \end{enumerate}
   \item پنج
   \item شش
\end{enumerate}
```

که نتیجه خروجی آن به شکل زیر میباشد:

(i) یک

(۱) دو

(۲) سه

(۳) چهار

(ii) پنج

(iii) شش

۳.۵.۳ ایجاد لیست با عنوان دلخواه

برای اینکه از عناوین در ایجاد لیست استفاده شود می توان از محیط description به صورت زیر استفاده نمود.

```
\begin{description}
  \item[Biology]      زیست شناسی
  \item[Physics]      علم فیزیک
  \item[Psychology] روانشناسی
\end{description}
```

که نتیجه خروجی به صورت زیر میباشد:

Biology زیست شناسی

Physics علم مواد و حرکت

Psychology روانشناسی

۶.۳ نوشتن جداول

رای رسم جدول در لاتک از tabular استفاده می‌شود. نخست باید آغاز و پایان آن را مشخص کنیم.

```
\begin{tabular}{lcr}

\end{tabular}
```

همزمان با این کار باید تعداد ستون‌های جدول نیز به لاتک معرفی شود. این کار با افزودن یکی از حروف c (برای ستونی با داده‌های مرکزچین)، l (برای ستونی با داده‌های چپ چین) و r (برای ستونی با داده‌های راست‌چین) داخل آکلاد انجام می‌شود، یعنی برای یک ستون راست‌چین از یک r، دو ستون راست‌چین دو r و .... سپس داده‌های سطر اول را در بین شروع و پایان محیط tabular قرار می‌دهیم. برای رفتن به سطر بعد هم از\\استفاده می‌کنیم.

محیط tabular نیز مثل یک قسمت از متن تلقی می‌شود و برای اینکه خصوصیات یک محیط پویا(شناور) را به آن بدهیم آن را در محیط table قرار داده و از دستور مربوطه برای وسط چین کردن و دادن عنوان هم بهره خواهیم برد(همانند محیط figure پارامترهای اختیاری مربوط به table هم به صورت کاملا مشابه قابل تنظیم هستند).

```
\begin{table}[htbp]
\centering
\caption{title}
\begin{tabular}{lcr}
column1 & column2 & column3 \\
column1 & column2 & column3 \\
column1 & column2 & column3 \\
\end{tabular}
\end{table}
```

۷.۳ قالب دهی به جدول و تعریف آن به صورت شناور

برای رسم خطوط جدا کننده در بین ستون ها یا سطرها از فرمان ها و نکات زیر استفاده می‌کنیم:

- اگر به هنگام تعریف محیط tabular در آرگومان دوم بین ستون ها از کاراکتر |(پایپ) استفاده کنید، به همان ترتیب و به همان تعداد بین ستون ها خط ایجاد می‌شود.
- برای تعریف خطوط بین سطرها باید در مکان مناسب از فرمان \hline استفاده کنید. به تعداد دلخواه می‌توانید از این فرمان استفاده نمایید.
- اگر می‌خواهید در پایان جدول نیز خط افقی رسم کنید، برخلاف گفته قبلی این بار باید در انتهای سطر آخر نیز از کاراکترهای \\استفاده نمایید.
- اگر می‌خواهید به جای رسم یک خط کامل بین سطرهای جدول، از خطوط ناقص استفاده کنید، باید از فرمان زیر استفاده کنید:

```
\cline{column#1 -column#N}
```

۸.۳ تعریف جدول به صورت شناور و نحوه ارجاع دادن به آن

برای تعریف جدول به صورت شناور و همچنین قابلیت ارجاع دهی و caption گذاری، باید به جدول به عنوان یک موجودیت مستقل نگاه کنید. برای اینکار باید آنرا در داخل یک محیط دیگر بنام محیط table تعریف کنید.

```
\begin{table}
\begin{tabular}
```

```
...
\end{tabular}
\end{table}
```

نکته ۱ : محیط table نیز همانند محیط figure از محیط های شناور است و خود لاتکس در مورد محل قرارگیری آن در صفحه تصمیم می‌گیرد.

نکته ۲ : با استفاده از دستور

```
\caption {name}
```

می‌توان به جدول زیرنویس اختصاص داد.

نکته ۳: برای ارجاع دادن به یک جدول همانند تصویر، ابتدا باید یک lable به آن اختصاص دهید و در ادامه با استفاده از lable به آن ارجاع دهید.

در زیر یک نمونه از جدول آمده است.

```
 \begin{table}[ht]
\begin{center}
\caption{ انتخاب‌های مختلف برای قسمت شعاعی توابع حدس اوّلیّه،
$\alpha=Z/a$ \cite{Wannier902013}. \label{tab:radial2}}
\begin{latin}
\renewcommand{\arraystretch}{0.6}
\begin{tabular}{|cc|}
\hline
 $n$ & $R_{\mathrm{n}}({\bf r})$ \\\hline
1 & $2 \alpha^{3/2}\exp(-\alpha r)$ \\\hline
2 & $\frac{1}{2\sqrt{2}}\alpha^{3/2}(2-\alpha r)\exp(-\alpha r/2)$ \\\hline
3 & $\sqrt{\frac{4}{27}}\alpha^{3/2}(1-2\alpha r/3+2\alpha^{2}r^{2}/27)\exp(-\alpha r/3)$ \\\hline
\end{tabular}
\end{latin}
\end{center}
\end{table}
```

که خروجی به شکل زیر دارد

جدول ۲.۳ – انتخاب‌های مختلف برای قسمت شعاعی توابع حدس اوّلیّه، $\alpha = Z/a$ [۳].

n	$R_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})$
1	$2\alpha^{3/2}\exp(-\alpha r)$
2	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\alpha^{3/2}(2-\alpha r)\exp(-\alpha r/2)$
3	$\sqrt{\frac{4}{27}}\alpha^{3/2}(1-2\alpha r/3+2\alpha^{2}r^{2}/27)\exp(-\alpha r/3)$

همانطور که مشاهده می‌شود خانه‌های جدول با & و سطور با استفاده از \\از هم جدا می شوند و \hline برای ایجاد خط فاصل بین سطور استفاده می‌شود. سایر ساختار در جداول مشابه به تصاویر است.

نمونه زیر یک جدول فارسی است

l	m_{r}	Name	$\Theta_{lm_{\mathrm{r}}}(\theta,\varphi)$
0	1	s	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	1	pz	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
1	2	px	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi$
1	3	py	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\varphi$
2	1	dz2	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$
2	2	dxz	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$
2	3	dyz	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$
2	4	dx2-y2	$\sqrt{\frac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\cos 2\varphi$
3	6	fx(x2-3y2)	$\frac{\sqrt{35}}{4\sqrt{2\pi}}\sin^3\theta(\cos^2\varphi-3\sin^2\varphi)\cos\varphi$
3	7	fy(3x2-y2)	$\frac{\sqrt{35}}{4\sqrt{2\pi}}\sin^3\theta(3\cos^2\varphi-\sin^2\varphi)\sin\varphi$

جدول ۳.۳ – توابع زاویه‌ای

روز	تعداد حاضرین
دوشنبه	۵۷
سشنبه	۱۱
چهرشنبه	۹۶
پنجشنبه	۱۲۲
جمعه	۲۱۰
شنبه	۱۹۸
یکشنبه	۴۰
جمع	۷۲۴

جدول ۴.۳ – نمونه‌ای دیگر از جدول

جدول به صورت لندسکیپ

جدول ۵.۳ – انتخاب‌های مختلف برای قسمت شعاعی توابع حدس اوّلیّه، $\alpha = Z/a$ [۳].

n	$R_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})$
1	$2\alpha^{3/2}\exp(-\alpha r)$
2	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\alpha^{3/2}(2-\alpha r)\exp(-\alpha r/2)$
3	$\sqrt{\frac{4}{27}}\alpha^{3/2}(1-2\alpha r/3+2\alpha^2 r^2/27)\exp(-\alpha r/3)$

۹.۳ محیط های ریاضی

می توانید از محیط های زیر استفاده کنید

section	definition
قضیه	theorem
لم	lemma
گزاره	proposition
نتیجه	corollary
ملاحظه	remark
مثال	example

۱.۹.۳ قضیه انتخاب

در این قسمت نشان می دهیم

لم ۱.۹.۳. *(قطری سازی)* نمونه یک لم اینجا آمده است.

برهان. نمونه یک اثبات در اینجا آمده است. ■

ملاحظه ۲.۹.۳. اگر به ازای تمام مقادیر n داشته باشیم $|u_n(.)| \leqslant M$

قضیه ۳.۹.۳. نمونه ای دیگر

مثال ۴.۹.۳. نمونه مثال

۱۰.۳ tikz و استفاده از آن

بسته تیکز (Tikz) احتمالاً قدرتمندترین ابزار برای تولید اشکال گرافیکی در لاتک است. به منظور استفاده از آن ابتدا باید قابلیت تصویرپردازی تیکز را با قرار دادن دستور زیر در دیباچه (preamble) فایل متنی فعال کنید:

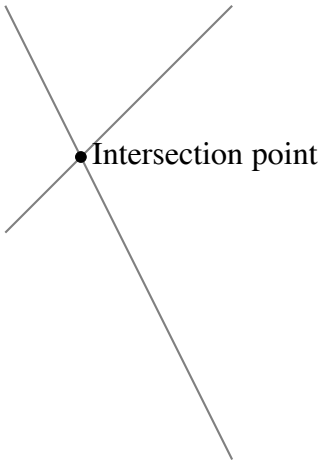
```
\usepackage{tikz}
```

محیط تصویرپردازی تیکز در متن با قرار دادن دستورات \begin{tikzpicture} و \end{tikzpicture} به ترتیب در ابتدا و انتهای دستورات این محیط فعال می‌شود. به عنوان مثال یک شکل گرافیکی را می‌توان به سادگی با تعدادی دستور مطابق زیر تولید کرد:

```
1 \begin{tikzpicture}
2 \draw[gray, thick] (-1,2) -- (2,-4);
3 \draw[gray, thick] (-1,-1) -- (2,2);
```

```
\filldraw[black] (0,0) circle (2pt) node[anchor=west] {Intersection point};
\end{tikzpicture}
```

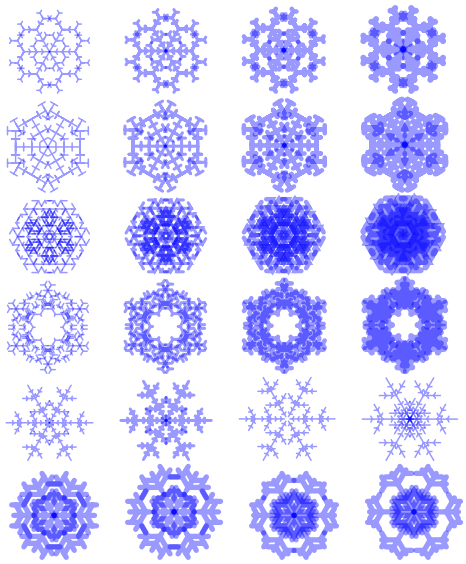
خروجی این دستورات به شکل زیر است:



در این مثال دو خط و یک نقطه رسم شده است. به منظور تولید خط از دستور \draw[gray, thick] استفاده شده که در آن یک المان گرافیکی تعریف شده که رنگ آن خاکستری (gray) و ضخامت آن کلفت (thick) است. خط در حقیقت با استفاده از دو نقطه انتهایی آن (-1,2) و (2,-4) که با علامت – به هم متصل شده اند تعریف شده است. نقطه نیز در واقع یک دایره توپر است که با استفاده از دستور \filldraw[black] رسم شده است. در این دستور مرکز دایره نقطه (0,0) و شعاع آن (2pt) تعیین شده است. در جلوی آن یک گره (node) تعریف شده که در حقیقت یک جعبه می‌باشد که شامل یک متن (در اینجا متن "intersection point") است که با دستور [anchor=west] در سمت راست نقطه قرار داده شده است. توجه کنید که در انتهای هر دستور رسم باید علامت نقطه ویرگول (;) را قرار دهید.

توجه: محیط رسم شکل تیکز را می‌توان در یک محیط دیگر مانند محیط شکل (figure) قرار داد.

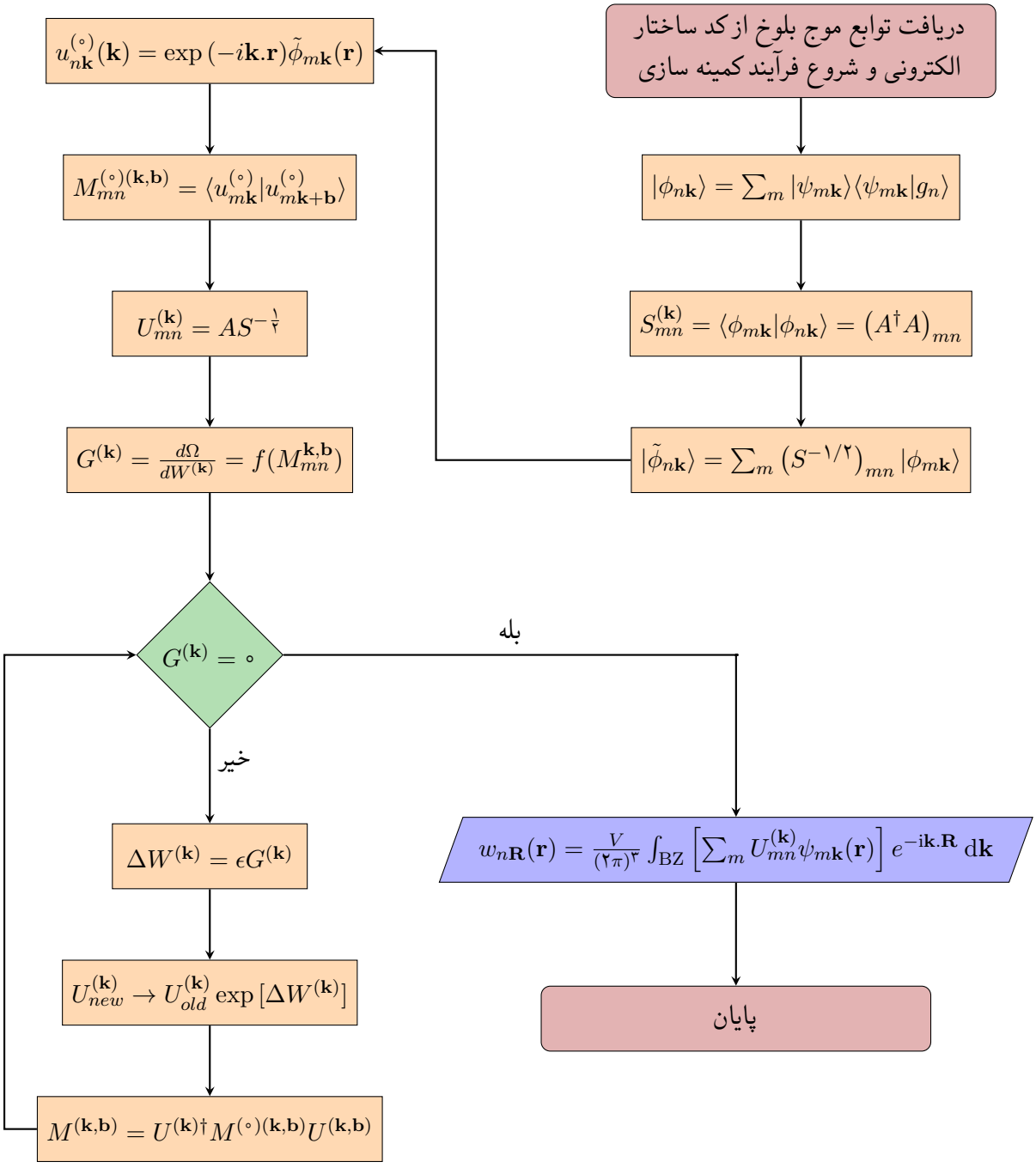
شکلهای زیاد و با گرافیک بالایی را می توان با استفاده از tikz تولید نمود .



در آدرس زیر نمونه‌های بیشتر را ببینید.

http://www.texample.net/tikz/examples/

نمونه‌ای از فلوچارت در ادامه آمده است برای دیدن چگونگی تولید روند نمای بالا با استفاده از Tikz به کد منبع



شکل ۴.۳ – روندنمای محاسبه‌ی توابع وانییر بیشینه جایگزیده

پایان‌نامه رجوع کنید.

فصل ۴

فهرست‌ها

۱.۴ فهرست مطالب ،اشکال و جداول

وقتی شما در این پایان‌نامه و یا در کلاسهایی مثل book برای شروع فصل از کلید \chapter{} استفاده می کنید و یا برای بخش‌هات و زیر بخش های از \section{} و \subsection{} سیستم لاتک خود تنظیمات ترتیب فصول را بر حسب تقدم آمدن آنها مرتب می کند. به این ترتیب هر جایی که بخواهیم فهرست مطالب چاپ شود فقط کافی است عبارت \tableofcontents اشکال و جداول نیز از قاعده‌ای مشابه پیروی می کنند و جایی که بخواهیم لیست آنها را چاپ کنیم از به ترتیب از \listoffigures و \listoftables استفاده می‌کنیم.

۲.۴ لغتنامه و فهرست اختصارات

چگونگی اضافه کردن فهرست لغتنامه و همچنین اختصارات در آدرس زیر آمده است

http://www.parsilatex.com/mediawiki/index.php?title=%D8%B1%D8%A7%D9%87%D9%86%D9%85%D8%A7%DB%8C_%D8%A7%DB%8C%D8%AC%D8%A7%D8%AF_%D9%88%D8%A7%DA%98%D9%87%E2%80%8C%D9%86%D8%A7%D9%85%D9%87

متن زیر چگونگی اضافه کردن و نشتن لغات و اختصارات را نشان می‌دهد.

این نمایش جایگزیده در توسعه هامیلتونی‌های مدل –هابارد، تنگابست و...– نیز به کار رفته است که موجب بررسی سیستم‌های فرمیونی هم‌بسته‌ی قوی شده است[۹]. همچنین از آنها برای ساخت توابع گرین در فرمالیسم لانداور[1] به منظور مطالعه رسانندگی بالستیک[2][۱۰]، گرمایی[۱۱] و الکتریکی[۱۲] مواد به خصوص در مواردی که سرشت کوانتومی مدنظر است، استفاده می‌شود[۱۳]. ترابرد کوانتومی[3] زمینه‌ای است که توابع وانیر بیشینه جایگزیده در آن بسیار موفق عمل کرده است. در این شاخه به دلیل آنکه رفتار موضعی الکترون مدنظر است، این توابع با تولید

[1] Landauer
[2] Ballistic
[3] Quantum Transport

ماتریس‌های هامیلتونی که بیشتر عناصر دور از قطرشان صفر است و تقریباً سه قطری هستند، امکان دستیابی به تابع گرین را راحت‌تر می‌نماید؛ از این رو در محاسبات مربوط به ترابرد کوانتومی بسیار سودمنداند [۱۴].

نمونه اختصارات میکروسکوپ AFM[1] و همچنین می توانید متن زیر را برای بررسی بیشتر ببینید

در واقع این توابع معادل اوربیتال‌های مولکولی جایگزیده[۲] هستند و تصویری از طبیعت شیمیایی پیوندها در مواد ارائه می‌کنند[۱۵]. برای این منظور حالات الکترونی اشغالی را بر حسب توابع وانیر بیشینه جایگزیده[۳] بسط داده و اطلاعاتی مربوط به ویژگی‌های پیوند و مختصات شیمیایی مواد را به دست می‌آورند. رفتار موضعی الکترون در برخی پدیده‌های فیزیکی مانند ترابرد کوانتومی، ناخالصی در جامدات، اتم‌های سرد و... به استفاده از نمایش جایگزیده‌ی تابع موج در فیزیک کوانتوم رونق بخشیده است. این‌گونه رفتارها در بررسی پدیده‌های الکترونیکی، اپتیک و لیزر، نانومواد و... نیز مهم هستند. در ادامه این بخش به پاره‌ای از پژوهش‌هایی که در حوزه ساختار الکترونی مواد با استفاده از توابع وانیر انجام می‌شود، به اختصار خواهیم پرداخت. برای آشنایی بیشتر با کاربردهای این توابع و به خصوص توابع وانیر بیشینه جایگزیده(MLWFs) می‌توان به مقاله‌ای که نیکولا مارزاری و دیگران در سال ۲۰۱۲ انتشار داده‌اند، مراجعه نمود.

کد مربوط به متن فوق را می‌توانید در فایل قالب لاتک ببینید. در این پایان‌نامه و با استفاده از این متد هر جا یکی از کلمات لغتنامه و یا اختصارات آمده باشد علاوه بر ایندکس‌گذاری، کلمه مربوطه زیرنویس نیز می شود. لغتنامه اختیاری است و می توانید با کامنت کردن خط مربوط به چاپ آن در فایل main.tex آن را از پایان‌نامه حذف کنید.

[1] Atomic Force Microscopy
[2] Localized Molecular Orbitals
[3] Maximum Localized Wannier Functions

پیوست الف

نمونه‌هایی برای وارد کردن کد برنامه‌ها

نمونه کد C

```c
#include <stdio.h>
int main(void)
{
   printf("Hello World!");
}
```

نمونه کد بش:

```
~$ sudo apt-get update & sudo apt-get upgrade
~$ sudo apt-get install python3 python3-numpy python3-scipy
~$ chmod +x fplo2wannier
```

نمونه کد پایتون:

```python
 #!/usr/bin/python3 -u
from sys import argv
arg=[int(x) for x in argv[1:4]]
xtel=1.0/arg[0]
ytel=1.0/arg[1]
ztel=1.0/arg[2]
x,y,z=0.0,0.0,0.0
with open("./wankp","w") as f:
  f.write("%s f 1 1 \n"%(arg[0]*arg[1]*arg[2]))

for z in range(arg[2]):
  for y in range(arg[1]):
    for x in range(arg[0]):
      with open("./=.kp","a") as f:
        f.write("%s %s %s\n"%(repr(x*xtel).ljust(20),
                repr(y*ytel).ljust(20),repr(z*ztel).ljust(20)))
        print("%s %s %s\n"%(repr(x*xtel).ljust(20),
```

```
                repr(y*ytel).ljust(20),repr(z*ztel).ljust(20)))
```

نمونه کد برای زبان جولیا

```
#= This is a code sample for the Julia language
(adapted from http://julialang.org) =#
function mandel(z)
    c = z
    maxiter = 80
    for n = 1:maxiter
        if abs(z) > 2
            return n-1
        end
        z = z^2 + c
    end
    return maxiter
end

function helloworld()
    println("Hello, World!") # Bye bye, MATLAB!
end

function randmatstat(t)
    n = 5
    v = zeros(t)
    w = zeros(t)
    for i = 1:t
        a = randn(n,n)
        b = randn(n,n)
        c = randn(n,n)
        d = randn(n,n)
        P = [a b c d]
        Q = [a b; c d]
        v[i] = trace((P.'*P)^4)
        w[i] = trace((Q.'*Q)^4)
    end
    std(v)/mean(v), std(w)/mean(w)
end
```

نمونه کد برای کد متلب

```
  n = 40;
y = randi([500, 600], 1, n);
a = zeros(n,1);

% PARFOR-Loop (no workers)
if matlabpool('size') > 0, matlabpool close, end
```

```

p1 = Par(n);

parfor id = 1:n
  Par.tic;
  a(id) = max(svd(rand(y(id))));
  p1(id) = Par.toc;
end

stop(p1);

plot(p1);

% Plot using optional colormap input
% plot(p1,@bone);
```

نمونه کد برای فرترن

```
 ! Der folgende Fortran-Code ist bei Wikipedia geklaut.
SUBROUTINE test( Argument1, Argument2, Argument3 )
   REAL,              INTENT(IN) :: Argument1
   CHARACTER(LEN= *), INTENT(IN) :: Argument2
   INTEGER,           INTENT(IN), OPTIONAL :: Argument3
   ! This makes sense
END SUBROUTINE
```

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

B

بالستیک ..... Ballistic ,2

L

اوربیتال‌های مولکولی جایگزیده ..... Localized
Molecular Orbitals ,3

M

توابع وانیر بیشینه جایگزیده Maximum Localized
Wannier Functions ,3

Q

ترابرد کوانتومی .... Quantum Transport ,2, 3

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

الف

اوربیتال‌های مولکولی جایگزیده، ۳ ..... Localized Molecular Orbitals

ب

بالستیک، ۲ ..... Ballistic

ت

ترابرد کوانتومی، ۲، ۳ .... Quantum Transport

توابع وانیر بیشینه جایگزیده، ۳ ..... Maximum Localized Wannier Functions

فهرست اختصارات

A

AFM3, ... Atomic Force Microscopy

M

MLWFs3, ... Maximum Localized Wannier Functions

مراجع

[1] community, “Document_structure,” URL: https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Document_Structure. , 10

[2] N. Marzari, A. a. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, “Maximally localized Wannier functions: Theory and applications,” *Reviews of Modern Physics*, vol.84, pp.1419–1475, oct 2012. ISSN 0034-6861. doi:10.1103/RevModPhys.84.1419. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84.1419. , 25

[3] Wannier90, “wannier90 : User Guide,” *Manual*, no.October, 2013. URL: http://www.wannier.org/doc/user_guide.pdf. , 30, 32

[۴] مصطفی واحدی، ”درختان پوشای کمینه دورنگی مسطح،“ مجله فارسی نمونه، جلد ۱، صفحات ۲۲–۳۰، آبان ۱۳۸۷. برنمود:http://dx.doi.org/10.1103/PB.47.1651.

[۵] محمود امین طوسی، ناصر مزینی، و محمود فتحی، ”افزایش وضوح ناحیه ای،“ در چهاردهمین کنفرانس ملی سالانه انجمن کامپیوتر ایران، (تهران، ایران)، صفحات ۱۰۱–۱۰۸، دانشگاه امیرکبیر، اسفند ۱۳۸۷. تارنما:http://www.civilica.com/Paper-ACCSI14-ACCSI14_107.htm.

[6] H. Eschrig, K. Koepernik, and I. Chaplygin, “Density functional application to strongly correlated electron systems,” *Journal of Solid State Chemistry*, vol.176, pp.482–495, dec 2003. ISSN 00224596. doi:10.1016/S0022-4596(03)00274-3. URL: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022459603002743.

[7] K. Koepernik, B. Velický, R. Hayn, and H. Eschrig, “Self-consistent LCAO-CPA method for disordered alloys,” *Physical Review B*, vol.55, pp.5717–5729, mar 1997. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.55.5717. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.5717.

[8] I. Opahle, K. Koepernik, and H. Eschrig, “Full-potential band-structure calculation of iron pyrite,” *Physical Review B*, vol.60, pp.14035–14041, nov 1999. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.60.14035. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.14035.

[9] I. Schnell, G. Czycholl, and R. C. Albers, “Hubbard-U calculations for Cu from first-principles Wannier functions,” *Physical Review B*, vol.65, p.075103, jan 2001. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.65.075103. URL: http://arxiv.org/abs/cond-mat/0109303http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.075103. 36

[10] A. Calzolari, N. Marzari, I. Souza, and M. Buongiorno Nardelli, “Ab initio transport properties of nanostructures from maximally localized Wannier functions,” *Physical Review B*, vol.69, p.035108, jan 2004. ISSN 1098-0121. doi:10.1103/PhysRevB.69.035108. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.035108. 36

[11] I. Paul and G. Kotliar, "Thermal transport for many-body tight-binding models," *Physical Review B*, vol.67, p.115131, mar 2003. ISSN 0163-1829. doi:10.1103/PhysRevB.67.115131. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.67.115131. 36

[12] A. López-Bezanilla, F. Triozon, S. Latil, X. Blase, and S. Roche, "Effect of the chemical functionalization on charge transport in carbon nanotubes at the mesoscopic scale.," *Nano letters*, vol.9, pp.940–4, mar 2009. ISSN 1530-6984. doi:10.1021/nl802798q. URL: http://dx.doi.org/10.1021/nl802798q. 36

[13] Y.-S. Lee, M. B. Nardelli, and N. Marzari, "Band Structure and Quantum Conductance of Nanostructures from Maximally Localized Wannier Functions: The Case of Functionalized Carbon Nanotubes," *Physical Review Letters*, vol.95, p.076804, aug 2005. ISSN 0031-9007. doi:10.1103/PhysRevLett.95.076804. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.076804. 36

[14] S. Kim and N. Marzari, "First-principles quantum transport with electron-vibration interactions: A maximally localized Wannier functions approach," *Physical Review B*, vol.87, p.245407, jun 2013. ISSN 1098-0121. doi:10.1103/PhysRevB.87.245407. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.245407. 37

[15] S. F. Boys, "Construction of Some Molecular Orbitals to Be Approximately Invariant for Changes from One Molecule to Another," *Reviews of Modern Physics*, vol.32, pp.296–299, apr 1960. ISSN 0034-6861. doi:10.1103/RevModPhys.32.296. URL: http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.32.296. 37

A Guide for Writing Thesis by LaTeX in Isfahan University of Technology

Mersad Mostaghimi

m.mostaghimi@ph.iut.ac.ir.com

April 24, 2018

Department of Physics

Isfahan University of Technology,Isfahan 84156-83111,Iran

University Code: IUT-77142

Degree:M.S.c Language:Farsi

supervisor: Dr.Mahmud Ashrafizadeh

hashemifar@cc.iut.ac.ir.com

Abstract

In this project, we calculate the maximally localized wannier functions of a carbon chain and silisine by using FPLO and WANNIER90 packages. First the Marzari and Vanderbilt algorithm for finding the maximally localized wannier functions and the WANNIER90 code which is based on this algorithm, is introduced. We also introduce the Full Potential Localized Orbital method implemented in the FPLO package. Then the structural and electronic properties of carbon chain and silisine are calculated. Next,we use the Python script language and the results obtained within FPLO to develop a program for calculating the overlap and initial guess matrix which are required for Wannier90. Finally, the maximally localized wannier functions of carbon chain and silisine are calculated. in this procedure, the hybrid density of state are also computed .

Keywords: *wannier, FPLO, full potential, local orbital , hybrid density of state,wannier90, maximally localized wannier*



Isfahan University of Technology
Department of Physics

A Guide for Writing Thesis by LaTeX in Isfahan University of Technology

A Thesis

Submitted in partial fulfillment of the requirements

for the degree of Master of Science

by

Mersad Mostaghimi

Evaluated and Approved by the Thesis Committee, on April 24, 2018

Supervisor: Dr. M.Ashrafizadeh, Assoc. Prof	sign
Supervisor: Dr. S. J. Hashemifar, Assoc. Prof	sign
Advisor: Dr. M. Alaei, Assis. Prof	sign
Examiner: Dr. N. Rezaei	sign
Examiner: Dr. I. Abdolhoseini Sarsari, Assis. Prof	sign
Department Graduate Coordinateor: Dr. F. Shahbazi	sign



Isfahan University of Technology
Department of Physics

DISSERTATION SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT OF THE REQUIREMENTS FOR THE DEGREE OF

M.S.c

A Guide for Writing Thesis by LaTeX in Isfahan University of Technology

Supervisors

Dr.Mahmud Ashrafizadeh

Dr.Sayed Javad Hashemifar

Advisor

Dr.Mojtaba Alaei

by

Mersad Mostaghimi

Isfahan

2018