

ABCAP の使用法

東京理科大学工学部物理学科

浜田典昭

2005 年 8 月 18 日

全電子状態計算プログラム「All electron Band structure CALculaion Package (ABCAP)」abcap0503 の使用法について説明する。

1 準備

1.1 インストール

プログラムパッケージ `abcap0503.tar.gz` を適当なディレクトリで
`tar xvzf abcap0503.tar.gz`
とすると、ディレクトリ `abcap0503` 以下にパッケージが展開される。

1.2 ディレクトリ構成

abcap0503/		
<code>.env_gen</code>		環境変数設定の例
<code>Makefile</code>		全プログラムのコンパイル
<code>bin/</code>		実行ファイルの格納
<code>lib/</code>		アーカイブ (.a) 及びモジュール (.mod)
<code>include/</code>		インクルードファイル (.h)
<code>src/</code>		ソースファイル
<code>data/</code>		データファイル
<code>samples/</code>		計算例
<code>document/</code>		ドキュメントファイル

1.3 環境変数の設定例

カレントディレクトリを `path` に入れ、環境変数 `ABCAP` にプログラムパッケージのあるディレクトリをセットする。

```
tcsch
set path=(. $path)
setenv ABCAP /home/band/abcap0503
```

また、コンパイラの名前などを次の例にならってそれぞれの環境変数に入れる。

1.3.1 intel-ifc コンパイラの場合

```
setenv FC_TYPE gen
setenv FC ifc
setenv FO "-static -save -Vaxlib"

setenv CC_TYPE gen
```

```
setenv CC g++
setenv CO "-static"
```

ここで、後半は C++ 言語のための設定例であるが、今のところ必要ない。

1.4 コンパイル

トップディレクトリで `make` とすると、すべてのソースファイルをコンパイルし、モジュールファイル `*.mod` とライブラリファイル `*.a` をディレクトリ `lib` の下に格納し、さらに、実行ファイル `*.exe` をディレクトリ `bin` の下に格納する。拡張子 `exe` は Windows 的であるが、すべての実行ファイルにこの拡張子を付けている。

1.4.1 Makefile の内容

トップディレクトリに次の内容の Makefile がある。

```
all:
    cd src/tospace;make
    cd src/fft;make
    cd src/abc;make
    cd src/pig;make
    cd src/abc_s;make
    cd src/abc_p;make
    cd src/ayplot_s;make
    cd src/main;make

clean:
    cd src/tospace;make clean
    cd src/fft;make clean
    cd src/abc;make clean
    cd src/pig;make clean
    cd src/abc_s;make clean
    cd src/abc_p;make clean
    cd src/ayplot_s;make clean
    cd src/main;make clean
    -rm bin/*
    -rm lib/*
```

それぞれのサブディレクトリに Makefile があり、それを順次実行する内容となっている。なお、コンパイルやリンクはその場所の `Makefile_gen` ファイルの内容に従って行われる。これは環境変数 `FC_TYPE` に `gen` を指定したためである。コンピュータが替っても、環境変数 `FC` と `FO` の内容を変えるだけで多くの場合うまく行くと思われるが、別の `Makefile_???` を自分で作りそれを使用する場合は `FC_TYPE` に `???` を指定する。ただし、末端のディレクトリにあるすべての `Makefile_???` を用意する必要があり、かなりの労力を要する。

2 バンド計算の手順

2.1 計算用ディレクトリの設定

一つの計算につき一つのディレクトリを作る。たとえば、次のようなコマンドを入力する。

```
mkdir LaMn03c_f
```

```
cd LaMnO3c_f
$ABCAP/samples/Setnew.sh
```

このようにして、例題のディレクトリ \$ABCAP/samples/LaMnO3c_f_5/ および data ディレクトリ から、計算に必要なファイル (.data, .sh) を計算ディレクトリにコピーする。入力ファイル (.data) を修正して目的の物質を計算するが、修正せずに実行すると例題「強磁性立方晶 LaMnO₃」が走る。

2.2 実行順序

計算用ディレクトリの下で

H

とコマンドを打つと、以下の計算手順が画面に出る。

```
-----
(0) (ab_prp.data, atom.data)  ab_prp.sh
(1) (ab_input.data)          ab_in.sh
-----
(2) cd flapw, Set.sh, cd ../
(3) (ab_input.data)          f105.sh
                                bn_ef.sh
-----
(4a) (bn_atps.data)  bn_atps.sh  (p3_atps.data)  p3_atps.sh
-----gs plot.ps
(4b) (bnpl.data)    bnpl.sh
-----gs plot.ps (plot1.ps, plot2.ps)
(4c) (bn_pdos.data) bn_pdos.sh  (p2_dos.data)  p2_dos.sh
-----gs plot.ps (plot1.ps, plot2.ps)
(4d) bz00.sh  (p3_bz.data)  p3_bz.sh
        (bn_one.data)  bn_one.sh  (p3_fs.data)  p3_fs.sh
-----gs plot.ps
(4e) flchnl.sh    : Electron densities at nuclei
-----
(4f) (flchdn.data) flchdn.sh  flchdn_ts.sh
                                gnuplot flchdn?.gpl
-----
```

番号の順に実行する。ファイル名.data の内容を編集し、ファイル名.sh を実行する。a, b, c, ... で区別されたものの順番は任意である。なお、コマンドスクリプトファイルには拡張子.sh が付いている。

ディレクトリ src/abc_p にあるプログラムはパラメータ文を含んでおり、計算する系に応じてコンパイルし直す必要がある。これが上記 (2) であるが、小さな系を計算する場合はすでに ディレクトリ bin にある実行ファイルを使うことができる。この場合は、(2) は行わず、次の (3') を行う。すなわち、

```
-----
(2')
(3') (ab_input.data)          f104.sh
-----
```

である。

以下、「強磁性立方晶 LaMnO₃」例に沿って、それぞれのジョブを説明する。

2.3 ab_prp.sh

入力ファイル ab_prp.data (データは現実の結晶とはやや異なる)

```
-----
abcap-ab_prp.data
0                               !jpr
LaMnO3 cubic ferromag.
lattice parameter -2----*----3----*----4----*----5----*----
 4.1 4.1 4.1 90.0 90.0 90.0    !a,b,c[A], alpha,beta,gamma
space group      -2----*----3----*----4----*----5----*----
 3   1   3   0           !jdim, il(r,h,s,f,b,oz,ox,oy),ngen,inv
      5   0 1  0 1  0 1           !igen,jgen(2,3)
      19  0 1  0 1  0 1           !igen,jgen(2,3)
      25  0 1  0 1  0 1           !igen,jgen(2,3)
kinds of atoms  -2----*----3----*----4----*----5----*----
 3                               !# of kinds
 1   0.5  0.5  0.5   La           !jpos,position,aname
 1   0.0  0.0  0.0   Mn           !jpos,position,aname
 1   0.5  0.0  0.0   O            !jpos,position,aname
magnetic state  -2----*----3----*----4----*----5----*----
 2                               !jmag(0,1,2)
totally symmetric basis set -3----*----4----*----5----*----
 24.0  6                               !cut-off egmax0[Hr],lmax0
k-points (# of division) ---3----*----4----*----5----*----
 6  6  6                               !nx,ny,nz
iteration        -2----*----3----*----4----*----5----*----
 4  6  0.10  0.10           !method, n-method, pmix, amix
-----
```

- 1行目はファイルのヘッダー (abcap-に続いてファイル名)
- 4行目以降の、lattice, space, kinds, magnetic, totally, k-points などのキーワードはデータの属性を表し、最初の4文字がプログラムにより読まれ、判断される。これらのキーワードに続く一固まりのデータ(データブロック)はこのような形式に書かれていなければならない。データブロックは互いに順番を換えても良い。

変数	説明
jpr	プリントレベル (0 で良い)
thema	物質名などの任意の文字列
(lattice)	
a, b, c	慣用の a 軸、b 軸、c 軸の長さ
alpha, beta, gamma	慣用の a 軸、b 軸、c 軸の間の角度 (°)
(space group)	
jdim	系の次元 (=3)
il	格子型 (-1:R, 0:hex, 1:P, 2:F, 3:I, 4:C)
ngen	生成元 (generator) の数 (≤ 3)
inv	1 のとき反転中心に原点を移動する。(0 で良い)
igen, jgen	回転操作のコード番号、付随する並進操作 jgen の例: (0 1 1 2 0 1)=(0,1/2,0)

変数	説明
(kinds of atoms)	
nkat	原子の種類の数 (対称操作で重なる原子の組の数)
jpos	用いる座標系、 1: 慣用座標系 (A)、2: B 座標系、3: C 座標系
position	原子の位置座標
aname	(atom.data 中にある) 原子の名前
(magnetic state)	
jmag	0:非磁性、1:反強磁性、2:磁性

変数	説明
(totally symm.)	(電荷分布およびポテンシャルのための)
egmax0	平面波の cut-off energy[Hr]
lmax0	球面波の角運動量の最高値 (≤ 6)
(k-points)	
nx, ny, nz	慣用逆格子ベクトルの分割数 (計算 k 点)
(iteration)	
method	繰り返し計算の方法
n-method, pmix	この回数毎にクリアし単純混合する、混合の割合
amix	単純混合の割合 (old \times (1-amix)+new \times amix)

反強磁性を計算する場合、magnetic state セクションに up-spin と down-spin を入れ替える対称操作を一行加える。
Cr の場合は以下ようになる。

Cr (抜粋)

```
lattice parameter -2-----3-----4-----5-----*-----
  2.88 2.88 2.88 90.0 90.0 90.0 !a,b,c[A], alpha,beta,gamma
space group      -2-----3-----4-----5-----*-----
  3   1   3   0           !jdim, il(r,h,s,f,b,oz,ox,oy),ngen,inv
    5   0  1   0  1   0  1           !igen,jgen(2,3)
   19   0  1   0  1   0  1           !igen,jgen(2,3)
   25   0  1   0  1   0  1           !igen,jgen(2,3)
kinds of atoms  -2-----3-----4-----5-----*-----
  3                                           !# of kinds
```

```

1      0.0  0.0  0.0   Cr      !jpos,position,aname
1      0.5  0.5  0.5   Cr      !jpos,position,aname
magnetic state  -2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----
1                                                    !jmag(0,1,2)
      1   1 2  1 2  1 2                                !igen,jgen(2,3)
-----

```

この場合、Cr についての atom データは一つあればよい。プログラムが up-spin と down-spin を入れ替えて二つの Cr をセットしてくれる。

data/atom0.data ファイルの Cr の部分

```

-----
Cr
24.0  8  51.996  2.1
100 200 210 300 310 325 404 414
1.0 1.0 3.0 1.0 3.0 4.0 1.0 0.0
1.0 1.0 3.0 1.0 3.0 0.0 1.0 0.0
-----

```

2 行目最後の数字が MT 球の半径 [Bohr] である。3 行目の三桁の数字を nlp と書くと、 n が主量子数、 l が角運動量、 p が動径波動関数設定条件パラメータである。最後の 2 行が up-spin と down-spin の占有数で、多くの原子がスピン磁気モーメントを持つように設定されているが、非磁性の物質を扱う場合でもこのデータを使って良い。

ab-prp.sh を実行すると、以下で使う ab_input.data ファイルが作られる。標準的なことをするのであれば、データファイル ab_input.data は編集しなくてよい。

2.4 ab_in.sh

ab_in.sh では、次の 5 個のプログラムが走る。

- ab_in : 全対称基底関数を作り、
a_spw.dta と c_ssw.dta に書く。
- ab_inch: 原子の電子状態を計算し、
その重ね合わせとして初期電子密度を作る。
- ab_kpgn: 計算すべき k 点を生成し、
ファイル a_kp0.dta, と a_kp2.dta に書く。
- ab_size: 計算に必要なサイズを計算し、
ファイル f_size0.dta, f_size1.dta, para.inc,
para1.inc. に書く。
- ab_ospw: MT 球間の全対称基底関数の重なり積分を計算し、
f_ospw.dtb に書く。
ここで、.dta はアスキーファイル、
.dtb はバイナリーファイル。

やや大きな単位胞の物質の場合、ab_in や ab_inch で配列の大きさが足りなくなる。そのときは、Status あるいは Current という名のファイルを見るとどのプログラムでエラーが起きたか分かるので、それに応じて、ディレクトリ ab_in や ab_inch の下に行き、Set.sh を実行し、その指示に従ってコンパイル・リンクする。そこで作成された実行ファイルを使用するために ab_in.sh ファイルを編集する。

2.5 fl05.sh

計算ディレクトリ下のディレクトリ flapw において、Set.sh を実行すると、この系に対応したパラメータ (para.inc, para1.inc) で、コンパイル・リンクが行われる。その後、ディレクトリを一つ上がり計算ディレクトリに戻る。fl05.sh (または、fl04.sh) により繰り返し計算が行われる。

```
f105.sh  繰り返しの回数はこのファイルの中の変数 ITER_MAIN に
         指定する。たとえば、set ITER_MAIN = 16 で 16 回の繰り
         返し計算をする。この中では次のプログラムが走る。

f1_pot  :  密度汎関数理論に基づきポテンシャルを計算する。
f1_bnd  :  内殻電子および価電子の固有状態を計算する。
f1_chg  :  電子密度を計算する。
f1_ptuj :  +U 計算をするとき、軌道に依存するポテンシャルを
         計算する。
f1_pot  :  全エネルギーを計算する。
f1_mx5  :  入力と出力の電子密度の差を計算し、
         次の入力電子密度を決める。
```

fl05.sh を実行した後、check.sh を実行すると、繰り返し計算の最後の数回の結果が画面に表示される。画面に現れたものの中で、whole cell とあるのが、繰り返し一回毎の入出力の電子密度分布の差 [electrons/a.u.³] であり、 10^{-5} 程度になるとかなり収束しており、 10^{-7} 程度になると全エネルギーの 10^{-6} [Hr] の桁が動かなくなる。必要な物理量の収束が達成されるまで、fl05.sh を繰り返す。

2.6 bn_ef.sh

bn_ef.sh を実行すると、次の内容の f_ef.dta ファイルが得られる。

```
f_ef.dta ファイル
-----
abcap-ef [Hr]:  Fermi-level
0.2618408091477186E+00      1  40
18      20      40
15      15      40
-----
```

2 行目はフェルミ準位である。3 行目は、up-spin の 18 番目までのバンドが full に詰まり、20 番目までのバンドが部分的に詰まっている、すなわち金属的になっていることを示している。4 行目は、down-spin の 15 番目までのバンドが full に詰まり、それより上のバンドは完全に空いていることを示している。

3 描画ツール

3.1 結晶構造

bn_atps.sh と p3_atps.sh を実行することにより、結晶構造の図がファイル plot.ps にポストスクリプト言語で書かれる。ghostscript(gs) や ポストスクリプトプリンタにより描画することができる。

入力ファイル bn_atps.data

```
-----
1                               j-coordinate(1,2,3:座標系 A,B,C)
```

0.0 0.0 0.0 1.0 1.0 1.0 u1(3),u2(3)

1行目は2行目のデータの座標系を示す。2行目に示された2点と座標軸で作られる平行六面体の中の原子を描く。
bn_atps.sh を実行すると次の入力ファイルが作られる。

入力ファイル p3_atps.data

```
0      0      jpr,kpaper(0:port,1:land)
50.0 55.0 -68.0 reye[cm],theta[deg],phi[deg]
0.6      fscale[cm/Å]
2.6  0.20    bond length[Å], thickness[Å]
  1.429  0    La
  1.058  1    Mn
  0.741  2    0
```

変数	説明
jpr	プリントレベル (0 で良い)
kpaper	A4 の紙の向き
reye, theta, phi	目の位置の極座標
fscale	オングストロームに対する長さ [cm/Å]
bond length	ボンドスティックで結ぶ原子間距離の最大値 [Å]
thickness	ボンドスティックの太さ [Å]
元素名を含む各行	描く原子球の半径 [Å], 球面上の模様 (0,1,2,3,4)

原子球の半径としては MT 球の半径が入っているが、ボンドの太さや長さと共に、適当に変えてよい。結晶構造の出力結果を 1 に示す。

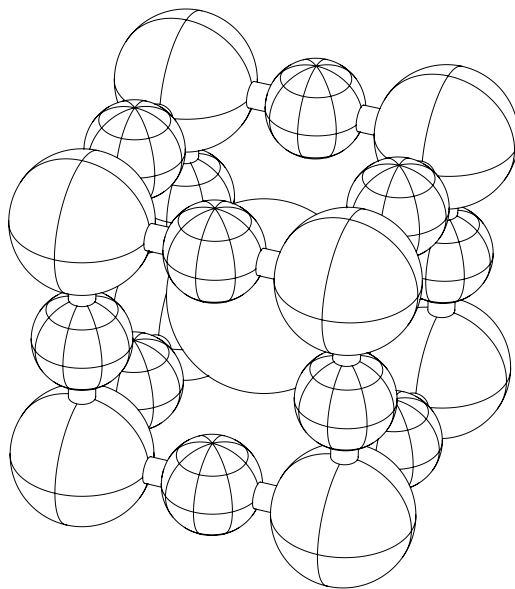


図 1 LaMnO₃ の結晶構造

3.2 バンド構造

bnpl.sh を実行することにより、バンド構造 (E-k カーブ) が得られる。

入力ファイル bnpl.data

abcap-bnpl.data

```
6 1          nlcomponent(6), nspin(0,3)
3 0          jpr, jmark
30.0 10.0    xscale(mm/unit), yscale(mm/unit)
-8.0 6.0 2.0 emin, emax, ed [eV]
5           # of axes
1 1 0 2   1 1 1 2   M    R
1 1 1 2   0 0 0 1   R gamma
0 0 0 1   1 0 0 2   gamma X
1 0 0 2   1 1 0 2   X    M
1 1 0 2   0 0 0 1   M gamma
LaMnO3 Ferro
```

変数	説明
1 行目	header
nlcomponent	6 とする。ファイル f_eig_s.dta の記述形式を表す。
nspin	作画するバンドのスピンの数 (0 or 3)
jpr	プリント制御
jmark	既約表現の番号を図の中に示すときは 1。
xscale	x 軸の scale(波数 1a.u. に対する長さ [mm])
yscale	y 軸の scale(エネルギー 1eV に対する長さ [mm])
emin,emax,ed	作画するエネルギーの範囲と目盛り [eV]
naxis	k 空間において作画する線分の数
k 点	線分の両端の k 点 $(k_x, k_y, k_z)/d$ [Å 座標系]
最後の行	題名

図の出力: nspin=0 のとき、非磁性および反強磁性の場合には plot.ps に出力され、強磁性の場合には plot1.ps と plot2.ps に出力される。結果を図 2 に示す。

強磁性の場合 nspin=3 とすると up-spin と down-spin が一つの図の上に描かれ、plot.ps に出力される。

作画の経路の部分は、simple cubic ならば

```
-----
-1          # of axes
sc
-----
```

とすれば、標準的な経路に沿った図が得られる。sc は結晶構造によって fcc, bcc, h(hexagonal), r(rhombohedral) などと取り替える。このデータは data/a_bnpl.data に書かれており、初めに計算用ディレクトリにコピーされる。適当に編集してもよい。

3.3 状態密度

bn_pdos.sh に続いて p2_dos.sh を実行する。

入力ファイル bn_pdos.data

```
-----
0          jpr
```

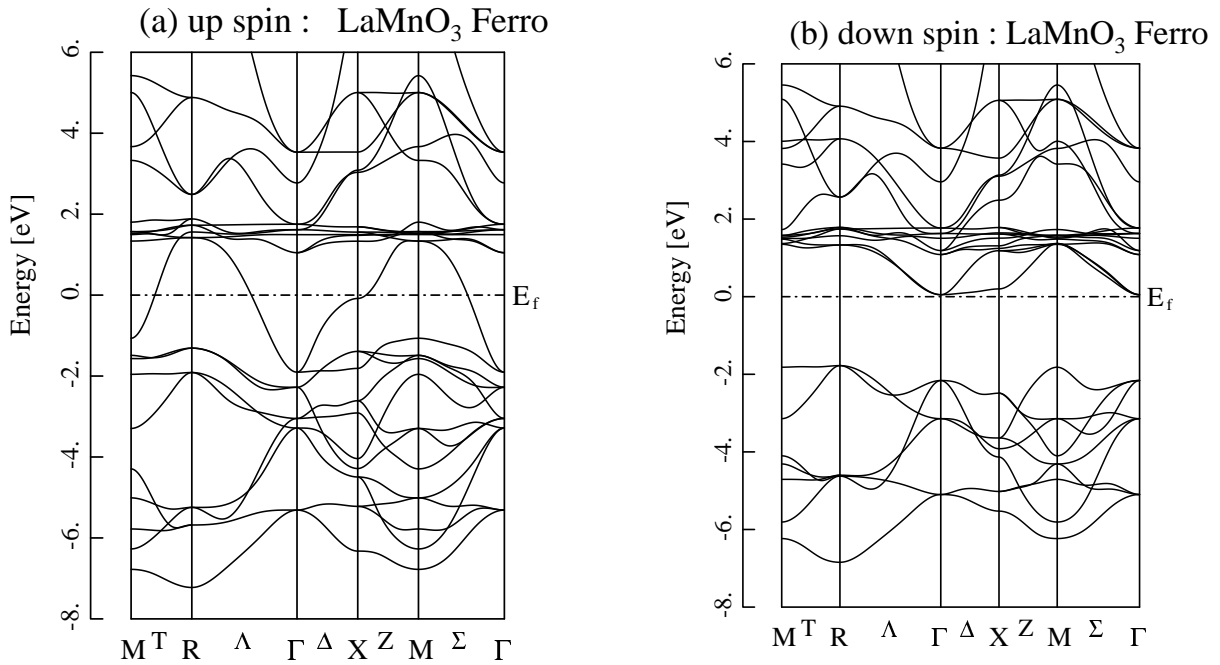


図2 LaMnO₃ のバンド構造

```

1000          # mesh
-8.0 6.0      energy range (eV relative to Ef)
1 500        neig1,neig2

```

bn_pdos.sh を実行すると、ファイル f.ds1.dta(up spin) と f.ds2.dta(down spin) に原子の種類毎に s, p, d, f の順に部分状態密度が書かれ、最後に全状態密度が書かれる。この例では (3 種類 × 4 + 1) 個のデータが書かれるので、p2_dos.data でそのデータ番号を指定して図を描く。

入力ファイル p2_dos.data

```

-----
0 0          jpr, kpaper
0           nspin(0)
1           iscale(0,1)
2 2         ifermi(1,2), iconv(0:Hr, 2:Hr-eV)
-8.0 6.0 2.0 emin,emax,de [eV]
7.0 2.0     dmax, dd
8.0 5.0     xe, yd (mm/u, mm/u)
LaMnO3d3
4 1         ncurve,jtype
total
1 13       nm(i),(im(j,i),j=1,nm(i)) 加える個数, データ番号
La 4f+5d
2 4 3      nm(i),(im(j,i),j=1,nm(i)) 加える個数, データ番号
Mn 3d
1 7        nm(i),(im(j,i),j=1,nm(i)) 加える個数, データ番号
0 2p
1 10       nm(i),(im(j,i),j=1,nm(i)) 加える個数, データ番号
-----

```

図3に状態密度の結果を示す。

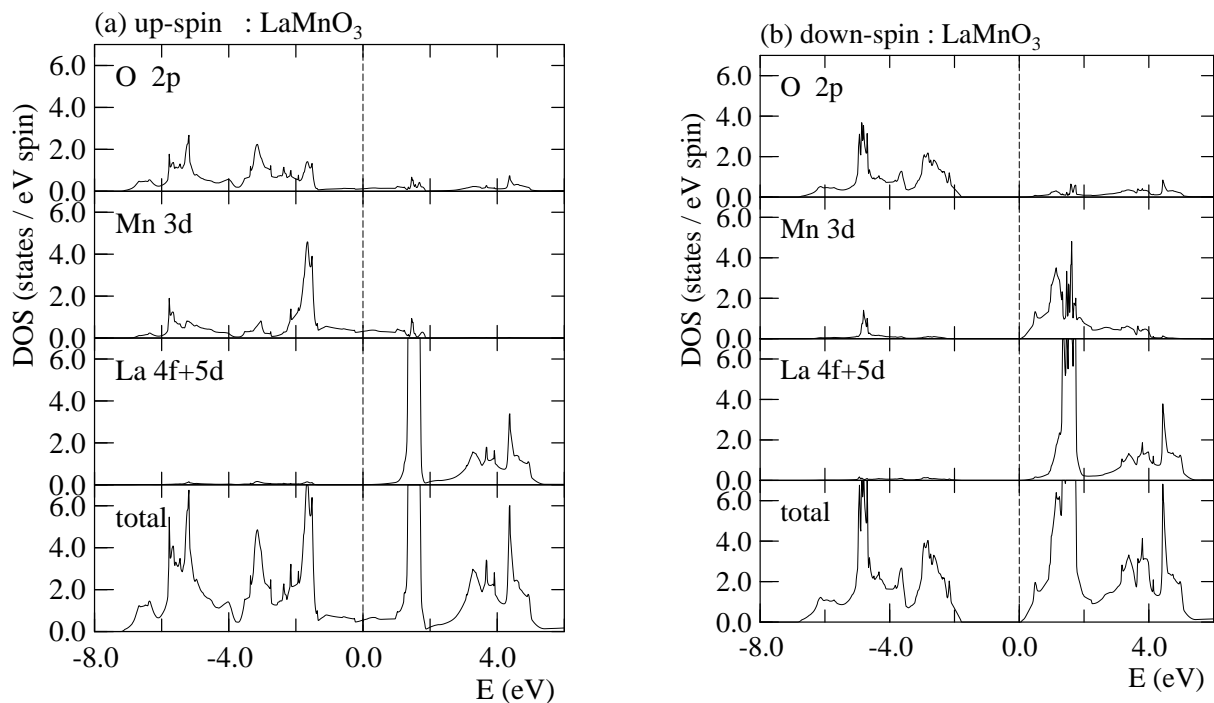


図3 LaMnO₃ の状態密度

3.4 ブリルアン域

bn_bz.sh と p3_bz.sh を順次実行するとブリルアン域の図が得られる。

入力ファイル p3_bz.data

```
-----
0 0 jpr, kpaper(0:portrait, 1:landscape)
0.0 0.0 0.0 (xa0(i),i=1,3)
10.0 scale(cm/k-space-unit)
100.0 70.0 10.0 reye[cm],theta, phi
-----
```

3.5 フェルミ面

bn_bz.sh, bn_one.sh, p3_fs.sh を順次実行すると一つのバンドのフェルミ面が得られる。

入力ファイル bn_one.data

```
-----
19 1 iband, ispin バンドの番号
-----
```

入力ファイル p3_fs.data

```
-----
0 0 jpr, kpaper(0:portrait ,1:landscape)
-1 0 0 0 jelec(1(es) or -1(hs)),jsurf(0 or 1),
jcut(0,1), ihokan(0)
0.0 0.0 0.0 (xa0(i),i=1,3)
-----
```

```

10.0          scale(cm/k-space-unit)
100.0  70.0  10.0  reye[cm],theta, phi
24 24 24  2 2 2  mx,my,mz, mmx,mmy,mmz

```

3.6 核位置でのスピン・電子密度

描画ツールではないが、flchnl.sh は flchnl.log または flchnl.txt に核の位置での電子密度を出力する。

3.7 電子密度分布図

コマンド cd flchdn, Set.sh, cd ../ によりプログラムをコンパイル・リンクした後、flchdn.sh と flchdn_ts.sh を順次実行し、さらに、

```

gnuplot flchdnt.gpl
gnuplot flchdns.gpl

```

とすると、電子密度分布とスピン密度分布の図が描画される。

入力ファイル flchdn.data

```

-----
2          dimension of map (2,3) --- 2のみ可
3-dimensional -----
5 5 5          nx,ny,nz
2-dimensional -----
0.0 0.0 0.0    pos(i) (i=1,3)
1.0 0.0 0.0 100  vec(i,1) (i=1,3)
0.0 1.0 0.0 100  vec(i,2) (i=1,3)
files -----
f_chg1.dta      file_upspin
f_chg2.dta      file_downspin
-----

```

4 LDA+U 法

LDA+U 法の入力について述べる。ab_prp.sh を実行すると、バンド計算全般で用いられる入力ファイル ab_input.data が得られる。このファイルの中で exchange-correlation potential セクションをたとえば次のようにする。

```

-----
exchange-correlation potential -
vwn
2  1.000000          lda+u, amix_u
1  3  12.0  1.0  kind, 1, U[eV], J[eV]
2  2   3.0  1.0  kind, 1, U[eV], J[eV]
-----

```

ここで、vwn は標準的に用いている Vosko, Wilk, Nusair の LDA の方法である。つぎの 2 は、その下の 2 行を入力として読み込むことを意味する。1 =La の 3 =f 軌道に U=12eV, J=1.0eV を、2=Mn の 2=d 軌道に U=3eV,

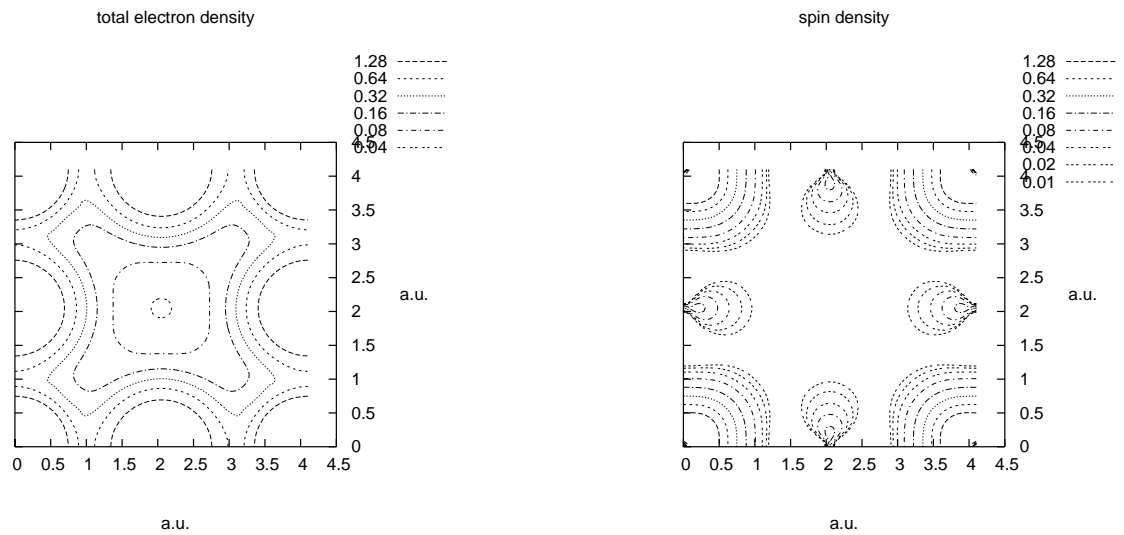


図4 電子およびスピン密度分布

$J=1.0\text{eV}$ をそれぞれセットし、LDA+U 法を実行する内容となっている。

LDA+U 法は収束がやや遅く、計算も不安定になりやすいので、LDA の繰り返し計算を数回行ったのち、ファイル bry.51 を消去してから、LDA+U の繰り返し計算を続けると良い。また、U を入れた部分は Hartree-Fock 近似の計算になり、複数の解が得られる可能性もあるので注意する必要がある。経験的計算であるので、物理的な考察をしっかりと行う必要がある [1]。

参考文献

- [1] 浜田典昭, 固体物理 39 743 (2004).