### ABCAP beginners 実習

2007 年 9 月 10 日 ( 浜田典昭 )

## 1 環境設定

シェルとして tcsh を用いる。~/.tcshrc ファイルの中に次の行を加える。

######## .tcshrc #########

setenv ABCAP /home/CMD/teac02/abcap0503

setenv FC\_TYPE gen
setenv FC ifort
setenv FO "-static -save -Vaxlib"

set path=(. \$path)

####### .tcshrc #########

### 2 計算の準備

ホームディレクトリの下に ディレクトリ abc を作り、その下にシェルスクリプトファイル Setnew0.sh をコピーしておく。(abc は好きな名前に変えてよい。)

\_\_\_\_\_

tcsh

cd ~

mkdir abc

cp \$ABCAP/sampleO/SetnewO.sh .

\_\_\_\_\_

Setnew0.sh は新しい物質の計算をするときに、実行コマンドと入力データの例を \$ABCAP/sample0/LaMnO3c\_f\_0/ からコピーして来るものである。

# 3 Siの計算例

計算ディレクトリの準備:

\_\_\_\_\_

cd ~/abc

mkdir Si

cd Si

../Setnew0.sh .

-----

コマンド H により計算手順が示される。基本的には、???.data を編集し、???.sh を実行することにより計算が進む。

[1] 結晶データと計算条件の入力:

ファイル ab\_prp.data を編集することにより行われる。

>>>>>> ab\_prp.data >>>>>>> Si

a=5.4296 A

face-centered (il=2)

generators 5 (0/1, 0/1, 0/1)

19 (1/4, 1/4, 1/4)

25 (1/4, 1/4, 1/4)

atomic position (0.0, 0.0, 0.0)

nonmagnetic (jmag=0)

>>>>>> ab\_prp.data >>>>>>>

-----

(ab\_prp.data) run ab\_prp.sh

\_\_\_\_\_

(ここで、run はこのマシン特有のコマンドで、空いているノードで ab\_prp.sh を実行してくれる。)

ab\_prp.sh を実行すると、ab\_input.data が作られる。バンド計算プログラムは ab\_input.data を入力として走る。(ab\_input.data はやや長いので、ab\_prp.sh がそれを作る。)

ab\_input.data は、ab\_prp.data を加工した結晶データと計算条件に、原子の情報を加えたものである。原子の情報は データベースファイル atom.data から得ている。

[2] バンド計算では出発となる電子密度分布が必要なので、これを原子の電子密度分布の重ね合わせとして計算する。

(ab\_input.data) run ab\_in.sh

\_\_\_\_\_

ab\_in.shでは、5個のプログラムが走り、

- 結晶構造のチェック、全対称基底関数の作成 (ab\_in.exe)
- 結晶の電子密度分布の初期データの作成 (ab\_inch.exe)
- 計算 k 点の作成 (ab\_kpgn.exe)
- 計算規模の見積り (ab\_size.exe)
- 全対称基底関数の重なり積分の計算 (ab\_ospw.exe)

が、行われる。

[3] 自己無撞着バンド計算の繰り返し計算を行う。 シェルスクリプトファイル flo5.sh を編集して、 パラメータ ITER\_MAIN に繰り返し計算の回数を 指定する。

(ab\_input.data) run f105.sh

f105.sh では多数のプログラムが順次走り、

- ポテンシャルの作成 (fl\_pot.exe)、
- 固有状態の計算 (fl\_bnd.exe)、
- 電子密度分布の計算 (fl\_chg.exe)、
- 密度行列の計算(fl\_dmmx.exe)、
- 全エネルギーの計算 (fl\_pot.exe)、
- 電子密度分布の次の入力データの作成 (fl\_mx5.exe)

を行う。なお、f1\_ptuj.exe は (入力パラメータ lda+u>0 の時のみ) LDA+U 法における+U ポテンシャルの計算を行う。

繰り返し計算(iteration)の各段階での情報がファイル iter.log に書かれている。コマンド

check.sh

で収束状況が画面に出る。

#### [4] 結晶構造の描画

ファイル bn\_atps.data に描画の範囲を A 座標系で与え、結晶構造を描く。bn\_atps.sh とp3\_atps.sh を走らせる。

[5] バンド構造 (e-k curve) の描画

k 空間内の線分を与え、それに沿ってバンド構造 を描く。道筋の例がファイル a\_bnpl.data に与 えられている。bnpl.sh を走らせる。

[6] 状態密度の描画

全状態密度、マフィンティン球の中の s,p,d,f 部分状態密度を描くことができる。 $bn_pdos.sh$  と  $p2_dos.sh$  を走らせる。

## 4 強磁性 Fe の計算

>>>>>> ab\_prp.data >>>>>>>

Fe

a=2.87 A

generators

body-centered (il=3)

5 (0, 0, 0) 19 (0, 0, 0)

25 (0, 0, 0)

atomic position (0.0, 0.0, 0.0)

magnetic (jmag=2)

>>>>>> ab\_prp.data >>>>>>>

### 5 反強磁性 Cr の計算

>>>>>> ab\_prp.data >>>>>>>> Cr

a=2.88 A

simple (il=1)

generators 5 (0, 0, 0)

19 (0, 0, 0)

25 (0, 0, 0)

atomic positions (0.0, 0.0, 0.0)

(0.5, 0.5, 0.5)

antiferromagnetic (jmag=1)

operation 1 (1/2, 1/2, 1/2)

>>>>>> ab\_prp.data >>>>>>>

## 6 その他

実行例が次のディレクトリにある。

/home/CMD/teac02/abc0/Si/

/home/CMD/teac02/abc0/Fe/

/home/CMD/teac02/abc0/Cr/

/home/CMD/teac02/abc0/LaMn03/