

# ABCAP beginners 実習

2008 年 9 月 3 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/sample0/Setnew0.sh abc/
-----
```

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 `f105.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 (`f1_pot.exe`)、
- 固有状態の計算 (`f1_bnd.exe`)、
- 電子密度分布の計算 (`f1_chg.exe`)、
- 密度行列の計算 (`f1_dmmx.exe`)、
- 全エネルギーの計算 (`f1_pot.exe`)、
- 電子密度分布の次の入力データの作成 (`f1_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_bnp1.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
body-centered (il=3)
generators 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/LaMnO3/
```