

ABCAP beginners 実習

2009 年 8 月 31 日作成

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 /sc/cmc/home/x60705/abcap0503

setenv FC_TYPE gen
setenv FC ifort
setenv FO "-static-intel -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) ab_prp.sh
-----
```

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) 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) fl05.sh
-----
```

fl05.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、fl_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。bnp1.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。

```
/sc/cmc/home/x60705/abc0/Si/
/sc/cmc/home/x60705/abc0/Fe/
/sc/cmc/home/x60705/abc0/Cr/
/sc/cmc/home/x60705/abc0/LaMnO3/
```