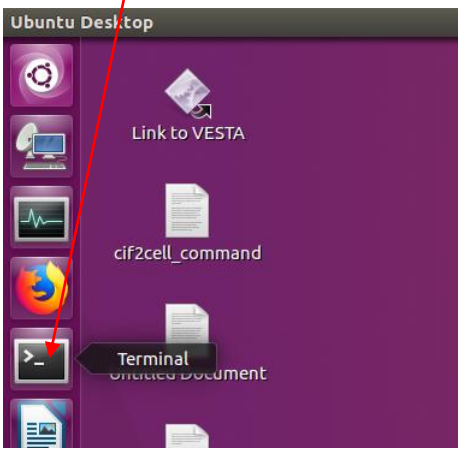
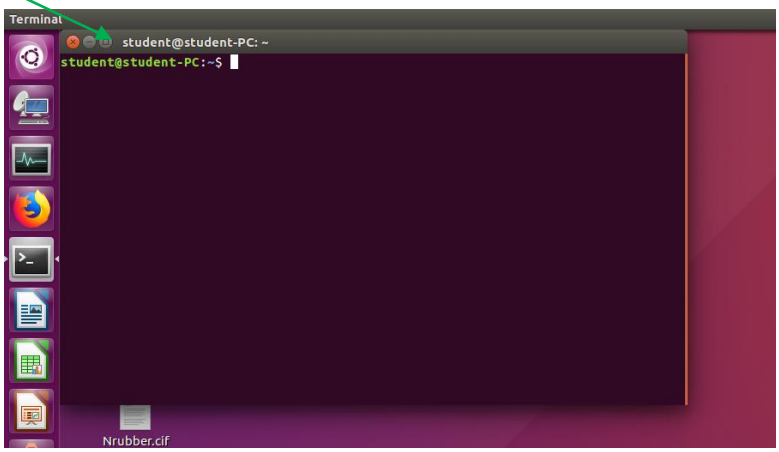
はじめての第一原理計算
（実習）WIEN2k
操作マニュアル

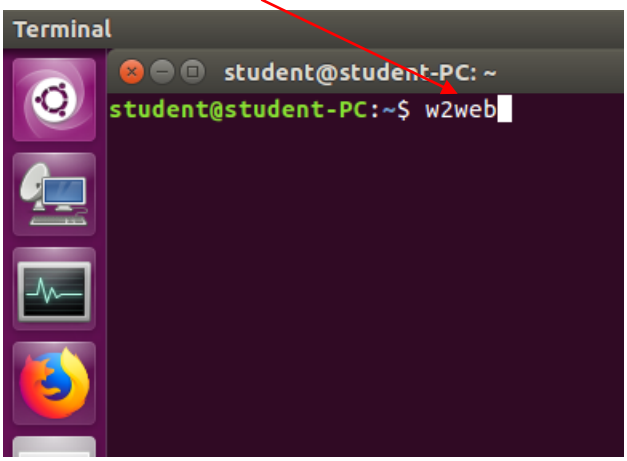
■ GUI(w2web)の起動

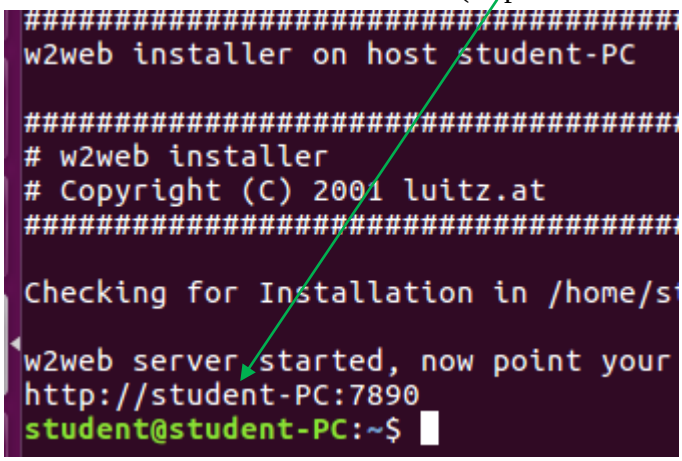
1. Terminal をクリック > Tarminal のウィンドウが開く



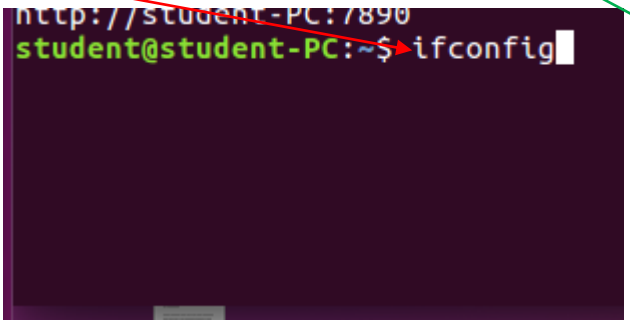


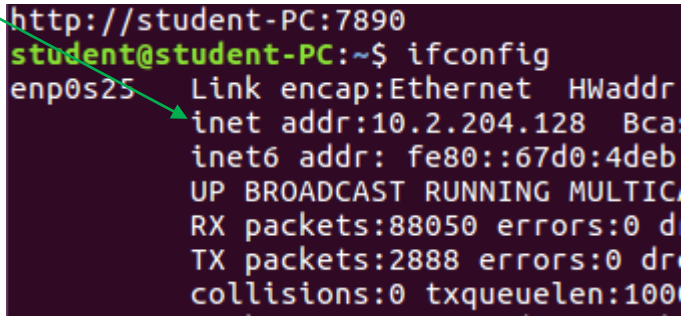
2. Terminal上で w2web と入力して Enter を押す > GUI（w2web）のURLが表示される (httpのある行)



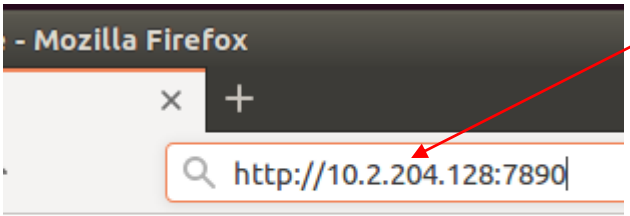


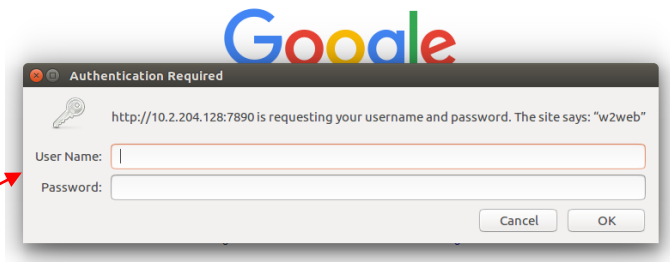
3. ifconfig と入力して Enter を押す > IPアドレス（inet addr）の情報が得られる





4.Firefox や Safariなどを開いて、GUI(w2wb)のURLの//から:までをIPアドレスに変えて入力



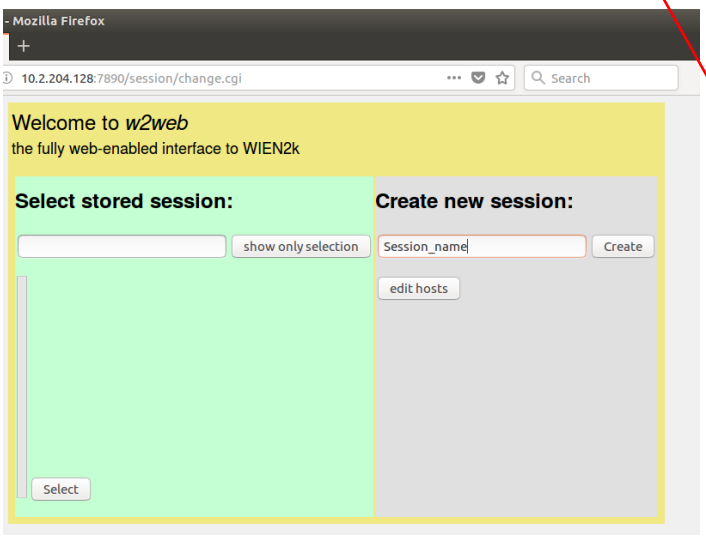


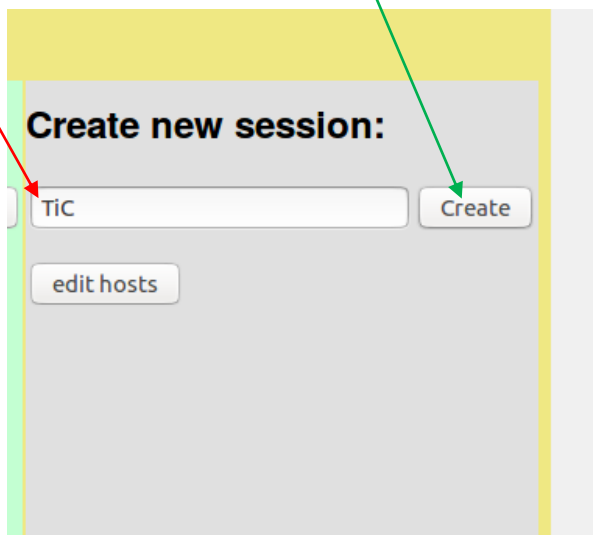
5. WIEN2kのUser NameとPasswordを聞かれるので入力

※ Linux PCに電源を入れたときに一度だけ行えばよい。上記の4以降は他のPCからでも行える

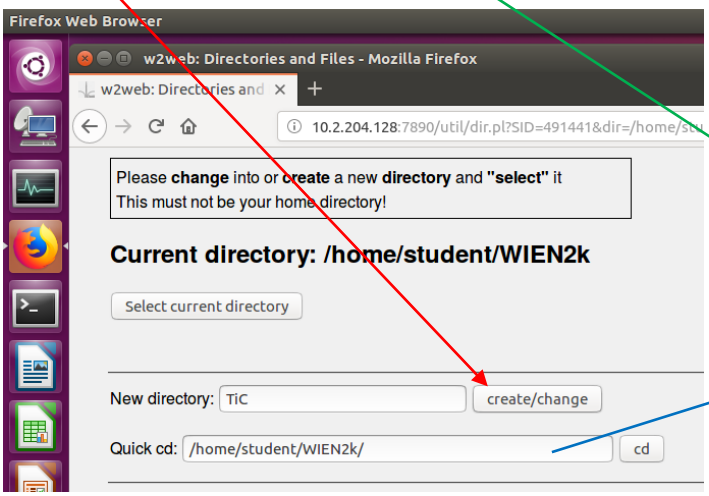
■ GUI(w2web)の操作 -1-（作業場所(フォルダ)の作成）

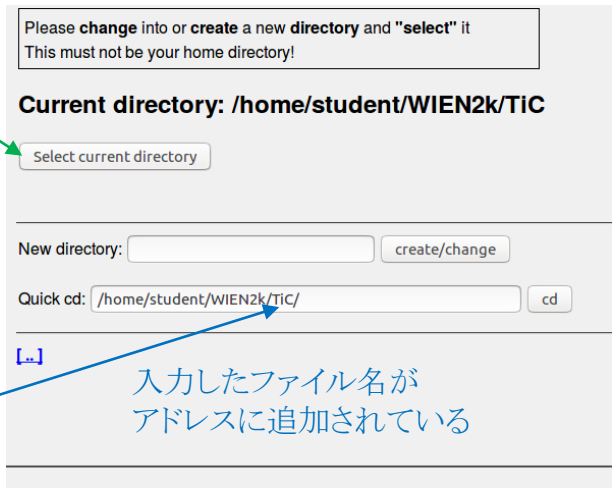
1. GUI(w2web)の画面 > Create new sessionの下の欄に好きなファイル名を入力 > Create をクリック



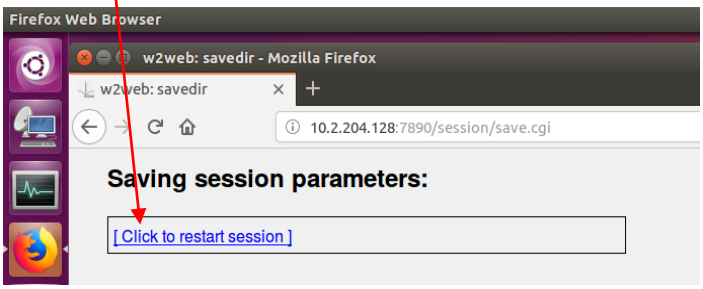


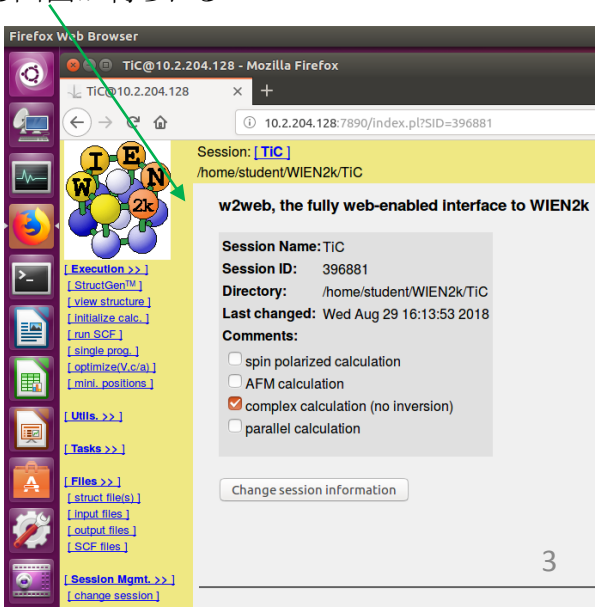
2. create/change をクリック > Select current directory をクリック





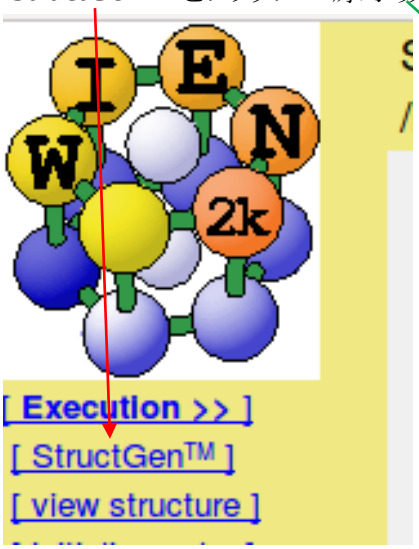
3. Click to restart session をクリック > 計算条件を入力する画面が得られる





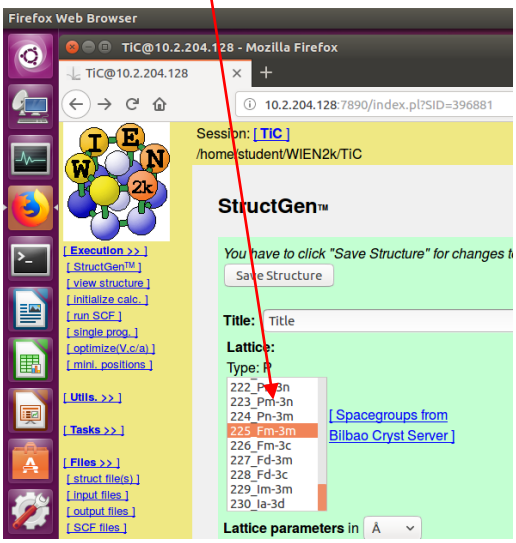
■ GUI(w2web)の操作 -2-（結晶構造の入力）

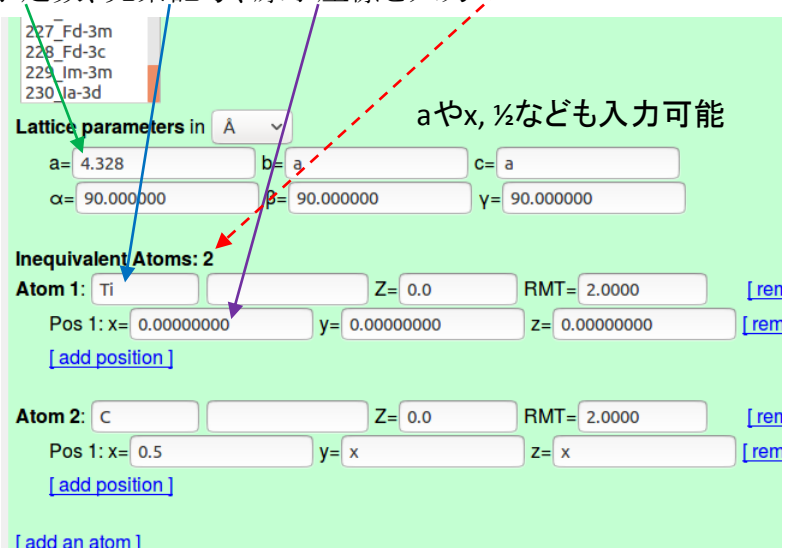
4. StructGen™ をクリック > 原子数を入力 し、Generate template をクリック



原子の数は、空間群を考慮したときに必要になる原子数。ハンドブックやcifに記載されている最小の原子数でよい

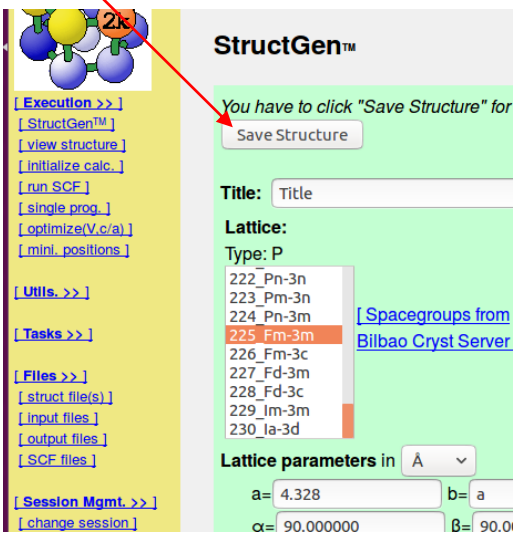
5. Lattice の下の欄から空間群を選択 > 格子定数、元素記号、原子座標を入力

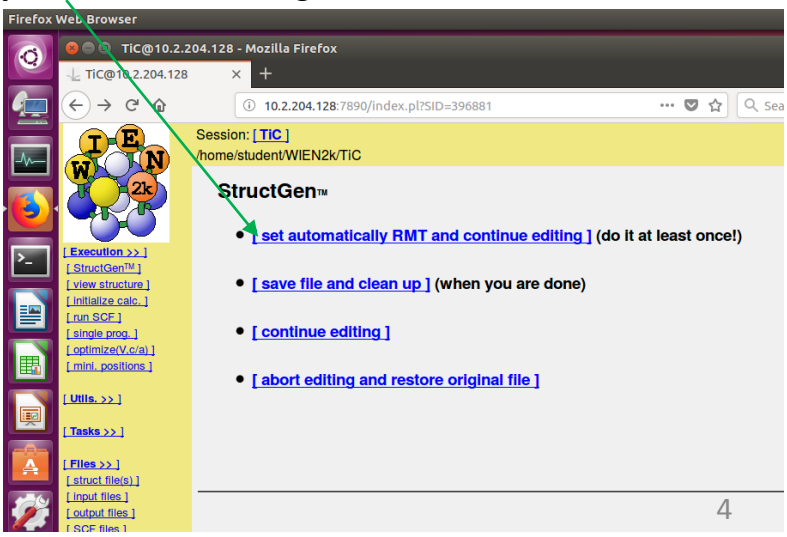




aやx, ½なども入力可能

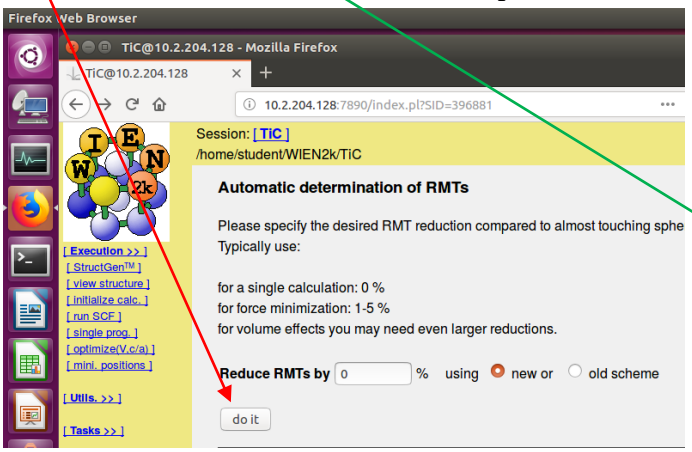
6. Save structure をクリック > set automatically RMT continue editing をクリック

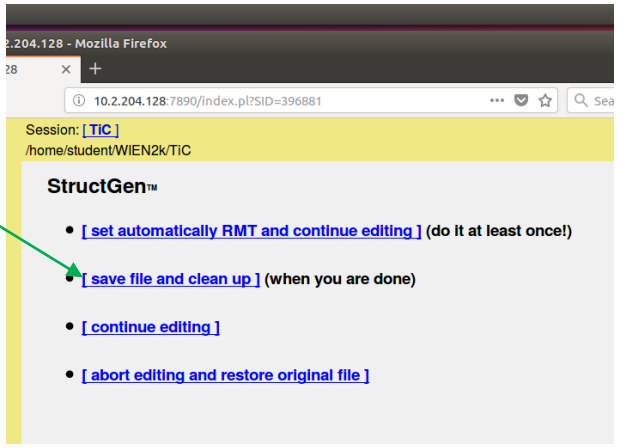




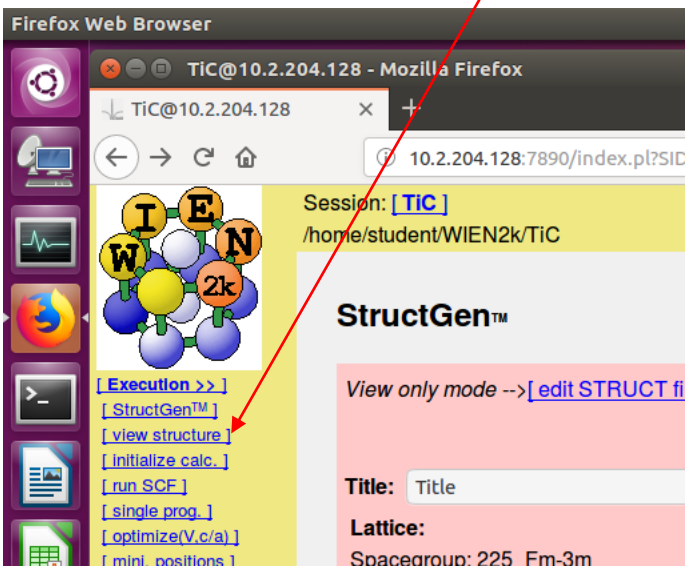
■ GUI(w2web)の操作 -3-（結晶構造の入力）

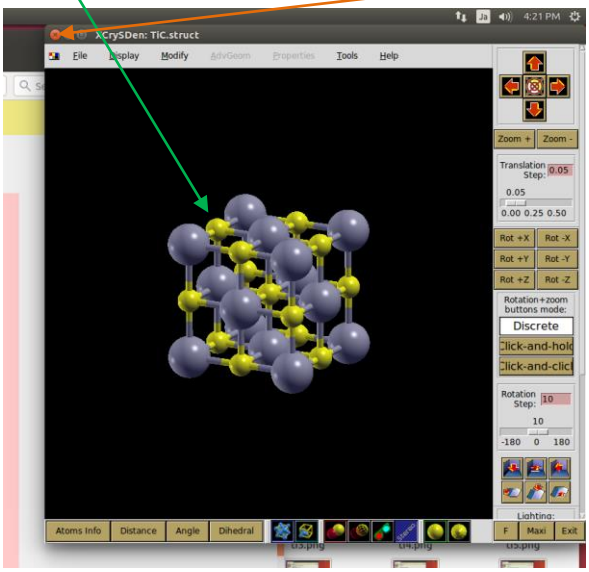
7. Do it をクリック > save file and clean up をクリック



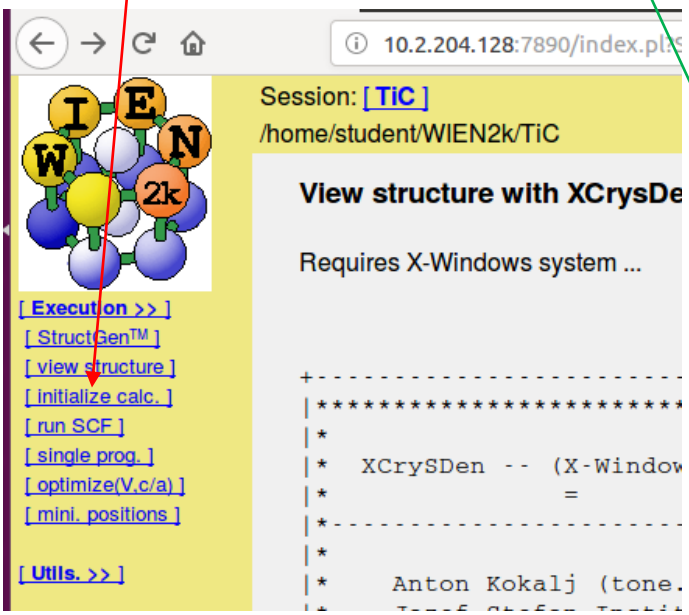


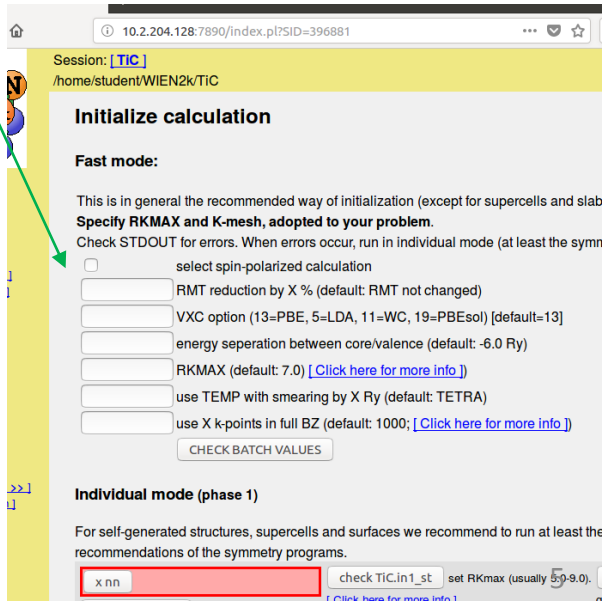
8. ピンク色の画面が得られる > view structure をクリック > 結晶構造が表示される > 確認後×で閉じる





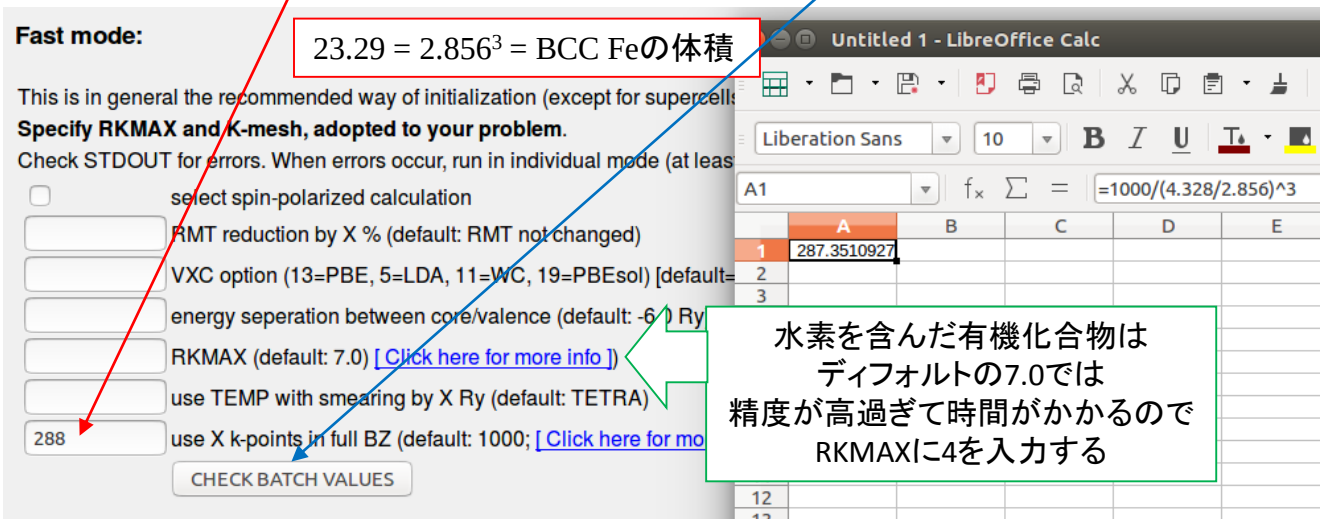
9. Initialize calc. をクリック > 計算条件を入力する画面が表示される



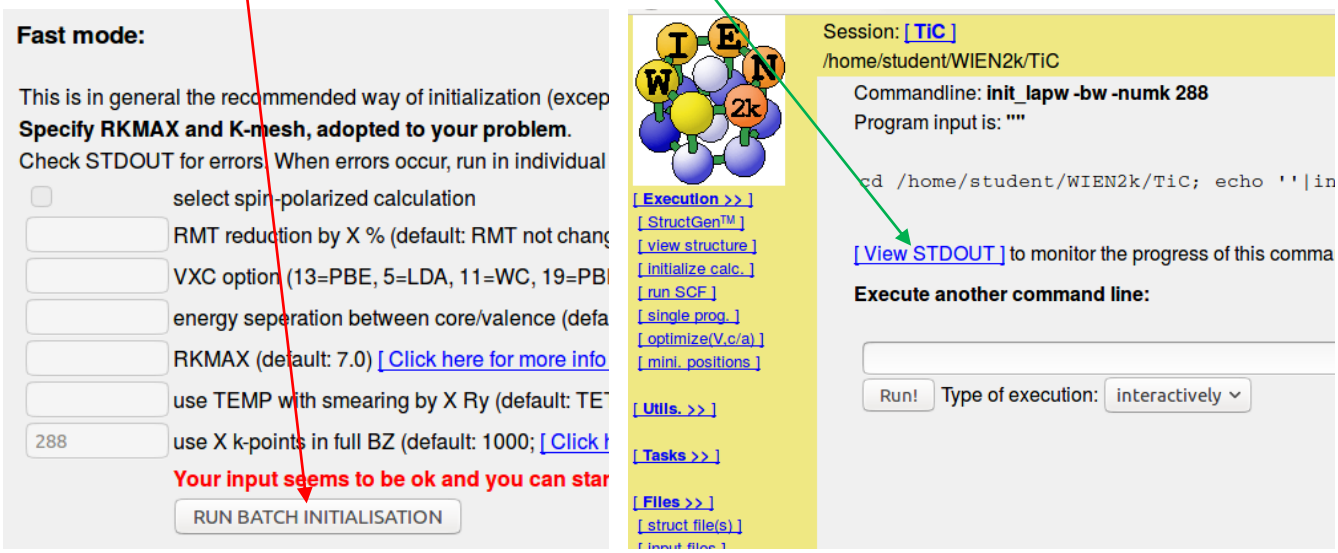


■ GUI(w2web)の操作 -4-（計算条件の設定）

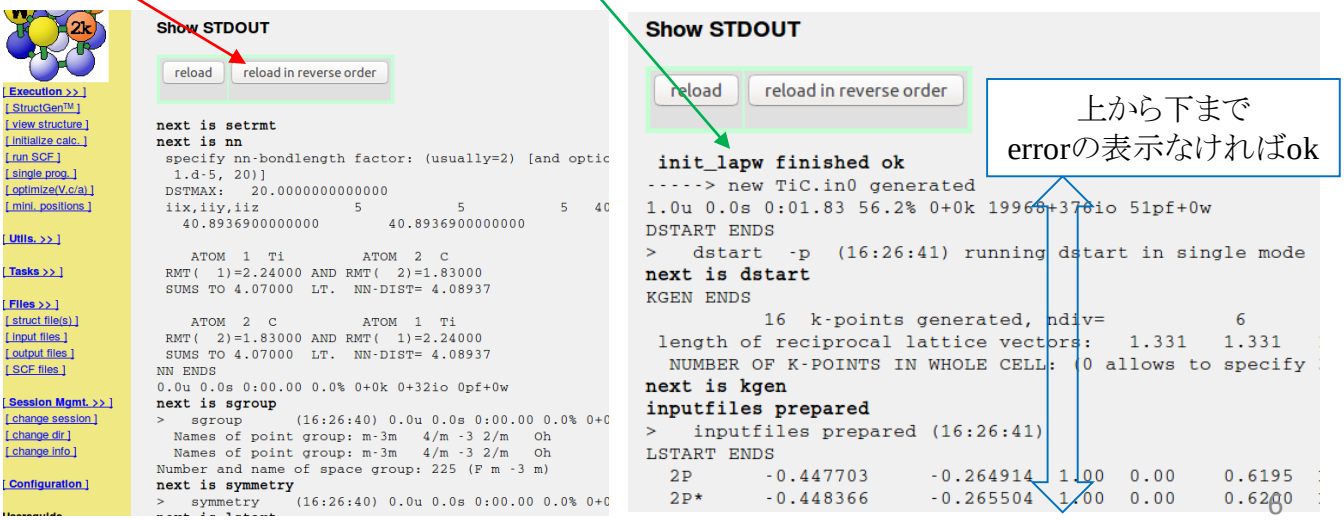
10. k点数=1000/(計算する系の体積/23.29) を入力 > CHECK BATCH VALUES



11. RUN BATCH INITIALISATION をクリック > View STDOUT をクリック

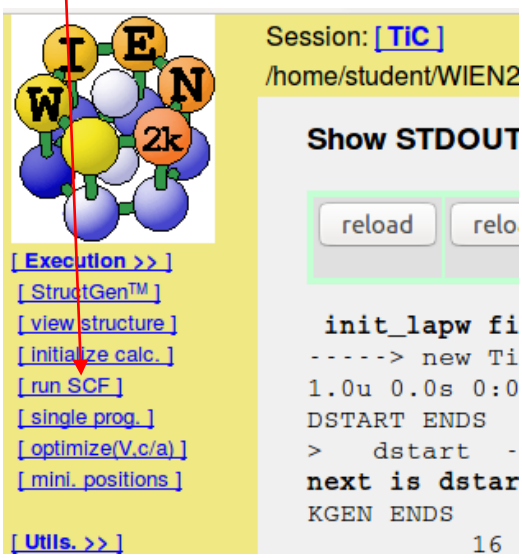


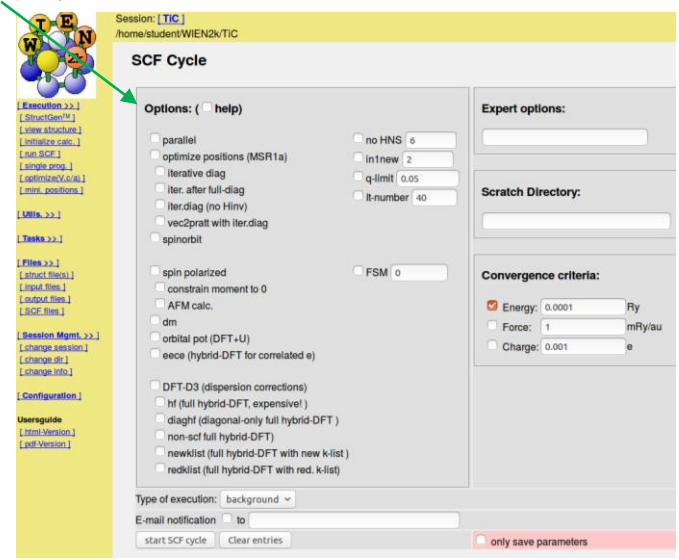
12. reload in reverse order をクリック > init_lapw finished ok で計算の準備が整う



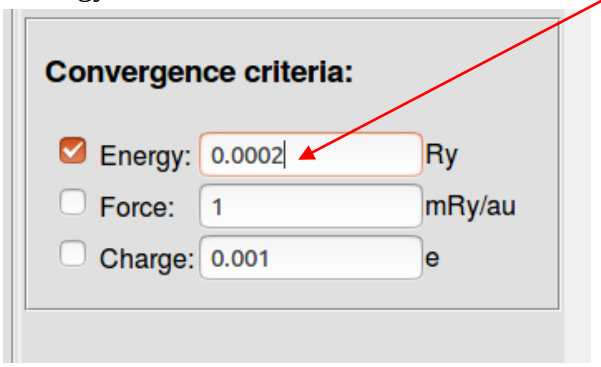
■ GUI(w2web)の操作 -5-（計算の実行）

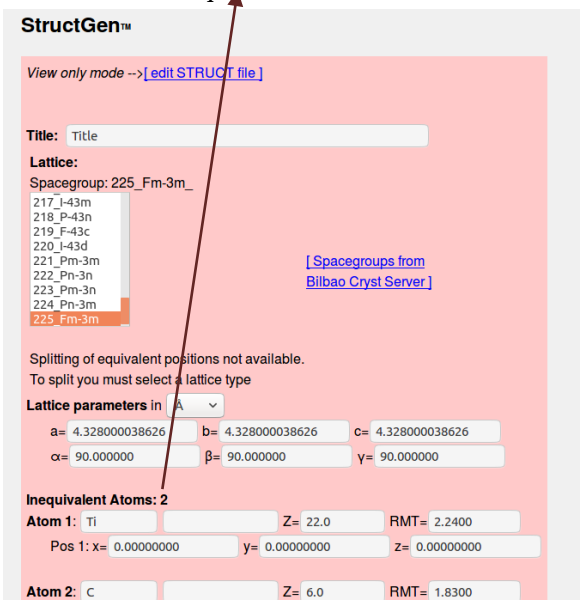
13. Run SCFを入力 > 計算を実行させる画面が表示される



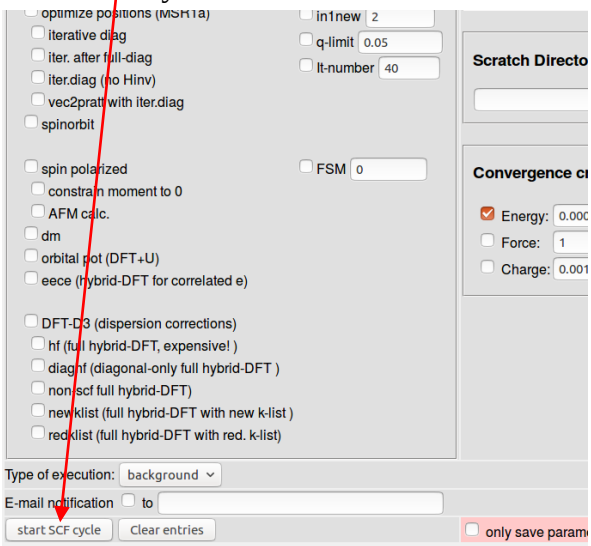


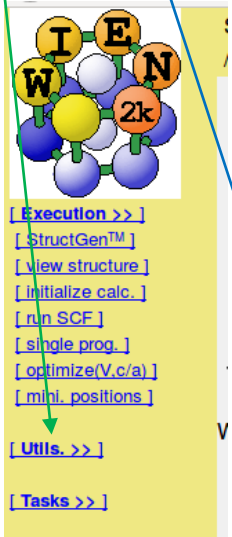
14. Energy は 1 meV/atom の精度で十分なので欄に 0.0001 * Inequivalent Atoms を入力





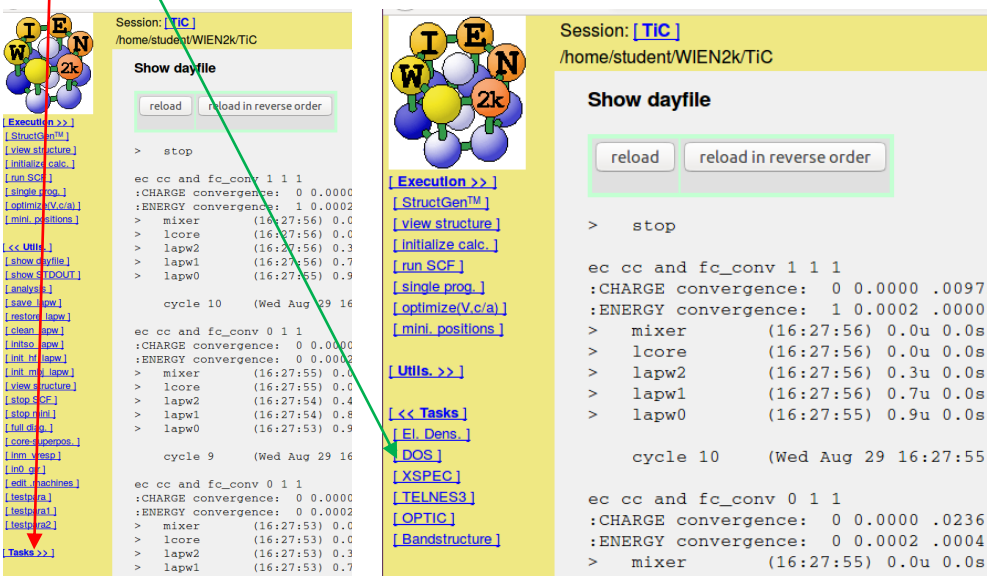
15. start SCF cycle をクリックで計算が始まる > Utils. > show STDOUT > reload reverse order



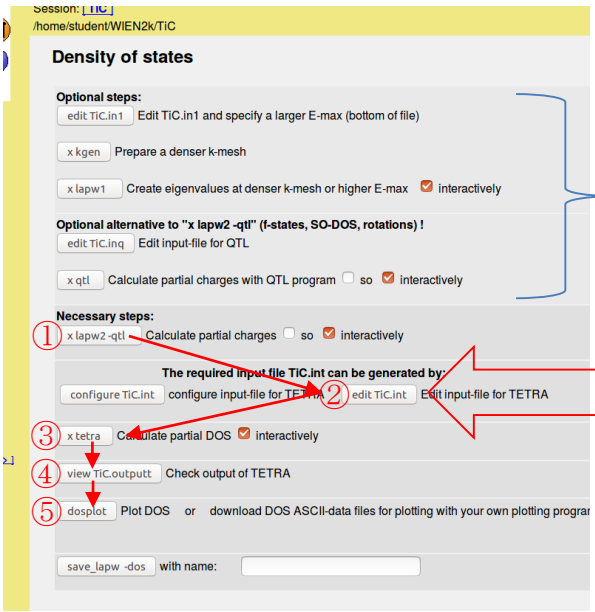


■ GUI(w2web)の操作 -6-（DOSの計算）

1. Tasks > DOS をクリック



2. 濃い灰色のところを下まで順番に表示されるボタンを押していけばよい（他のTasksも同様）

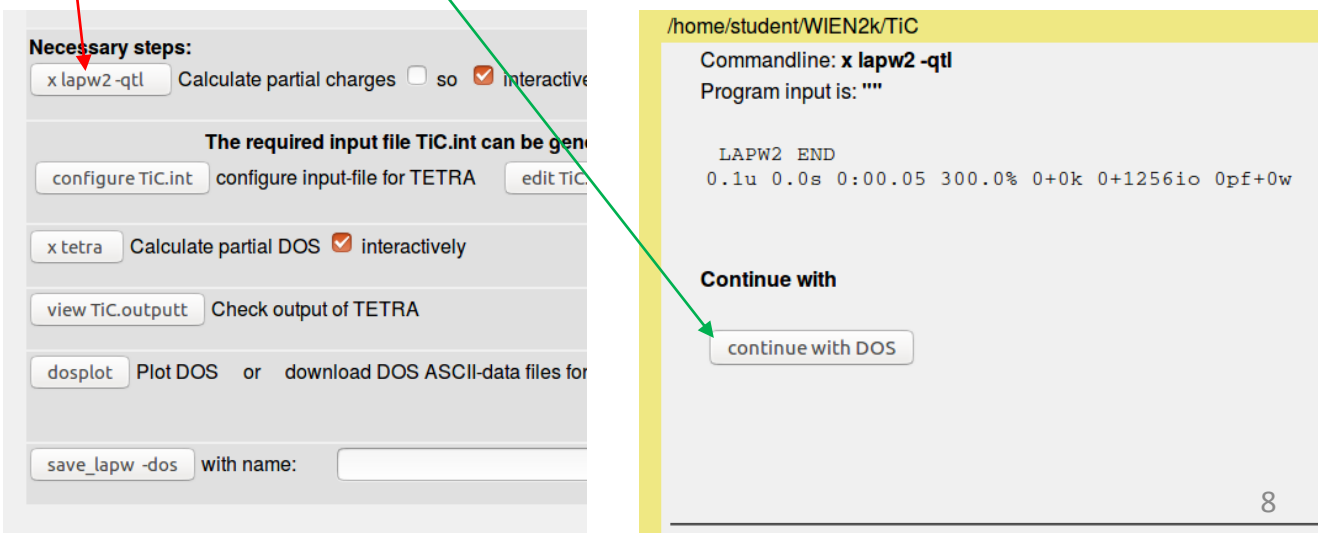


下記の3.から具体的に示していく

薄い灰色の範囲はオプションで
Versionが上がって追加された
計算に慣れたらトライしてみるとよい

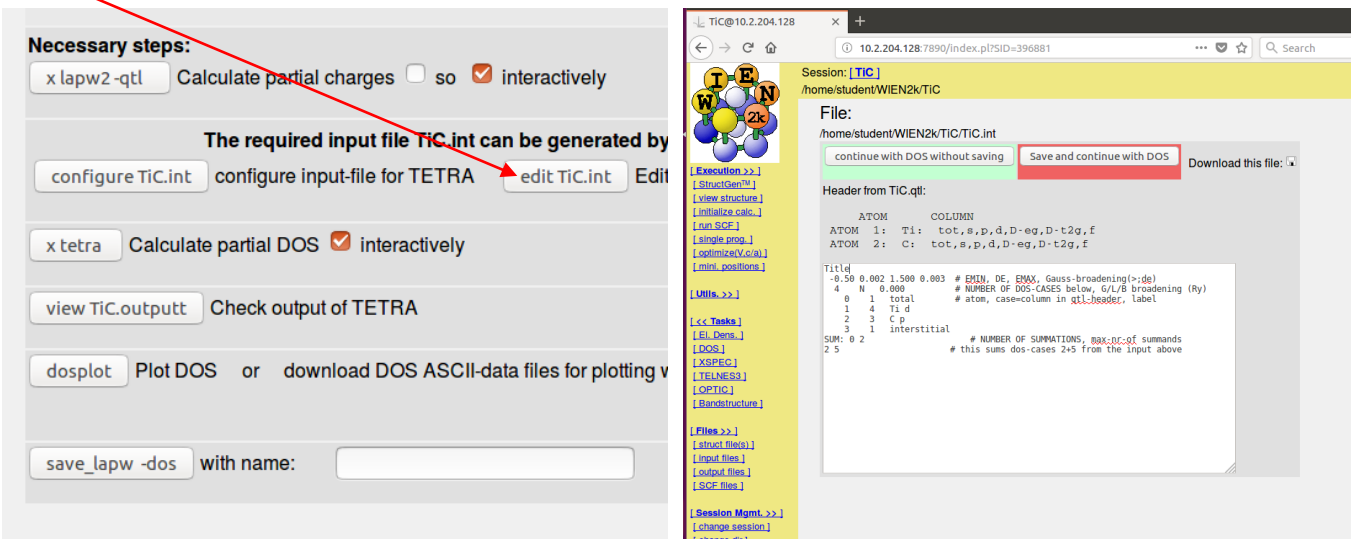
②は左側よりも
右側のボタンの方が
入力が分かりやすい

3. x lapw2 –qtl をクリック > continue with DOS をクリック（表示されたボタンを押していけばよい）

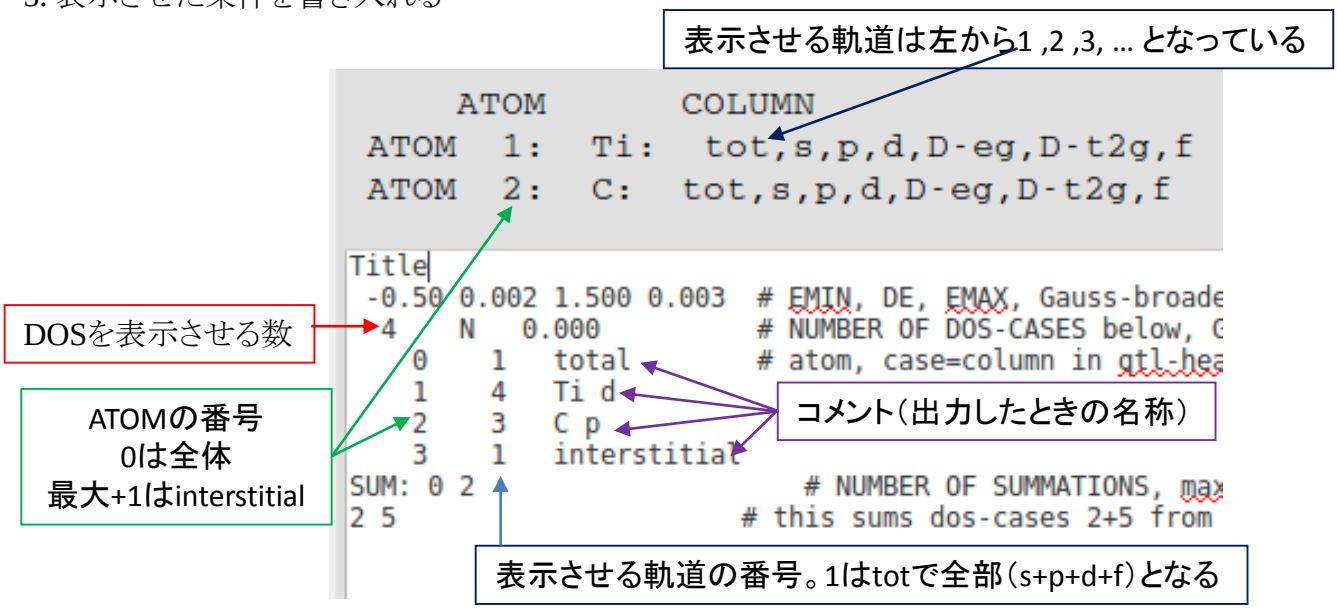


■ GUI(w2web)の操作 -7-（DOSの計算）

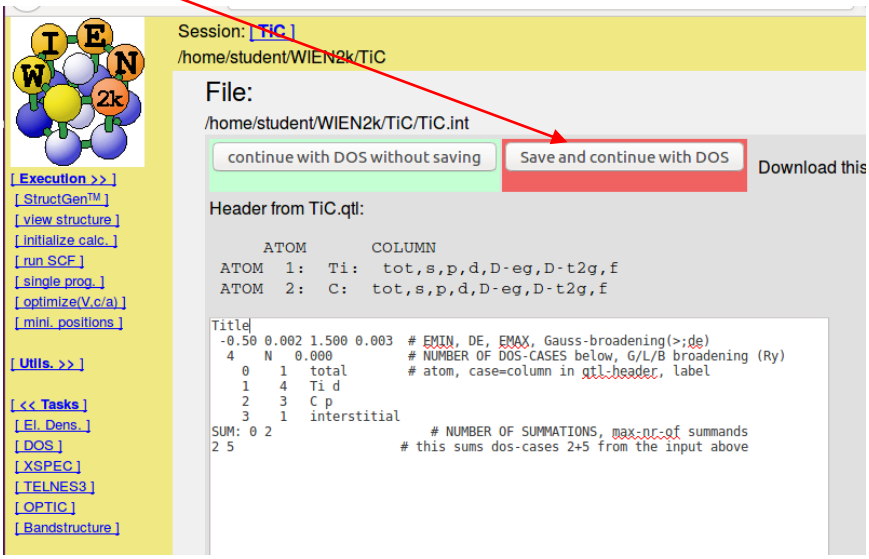
4. edit フォルダ名.int をクリック > 表示させる各原子の各軌道を入力する画面が開く



5. 表示させた条件を書き入れる

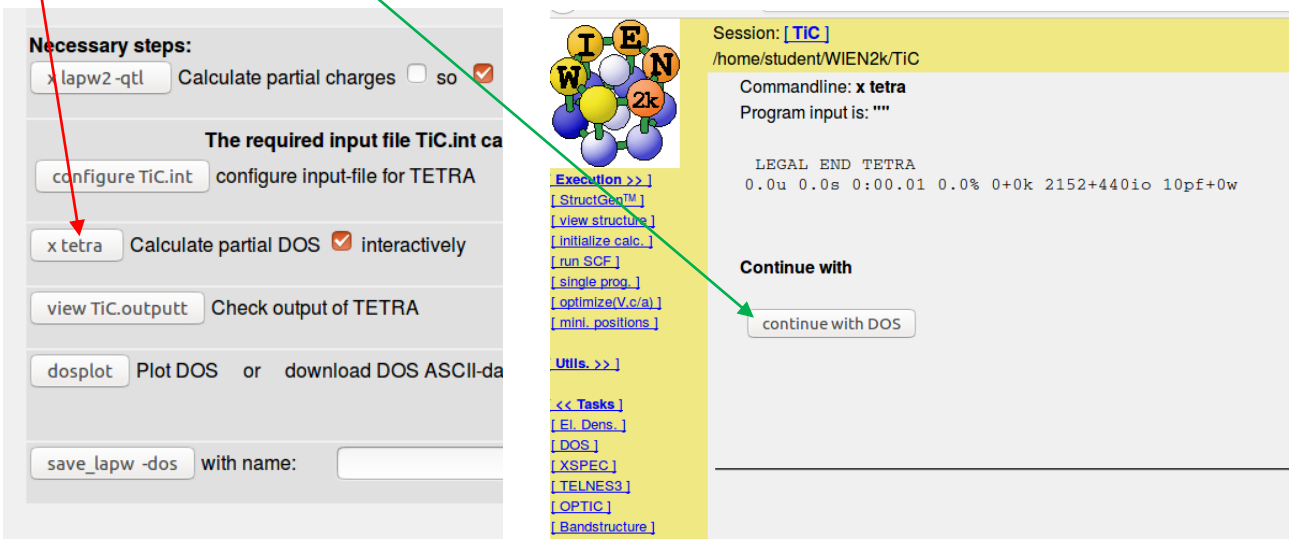


6. Save and continue with DOS をクリックして書き換えを保存する

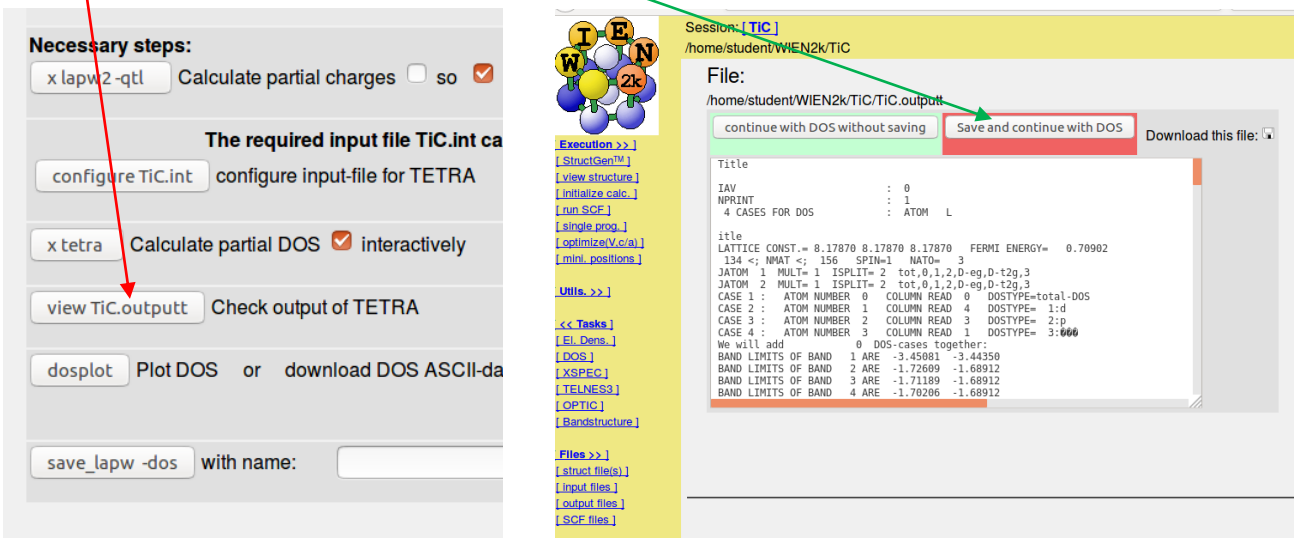


■ GUI(w2web)の操作 -8-（DOSの計算）

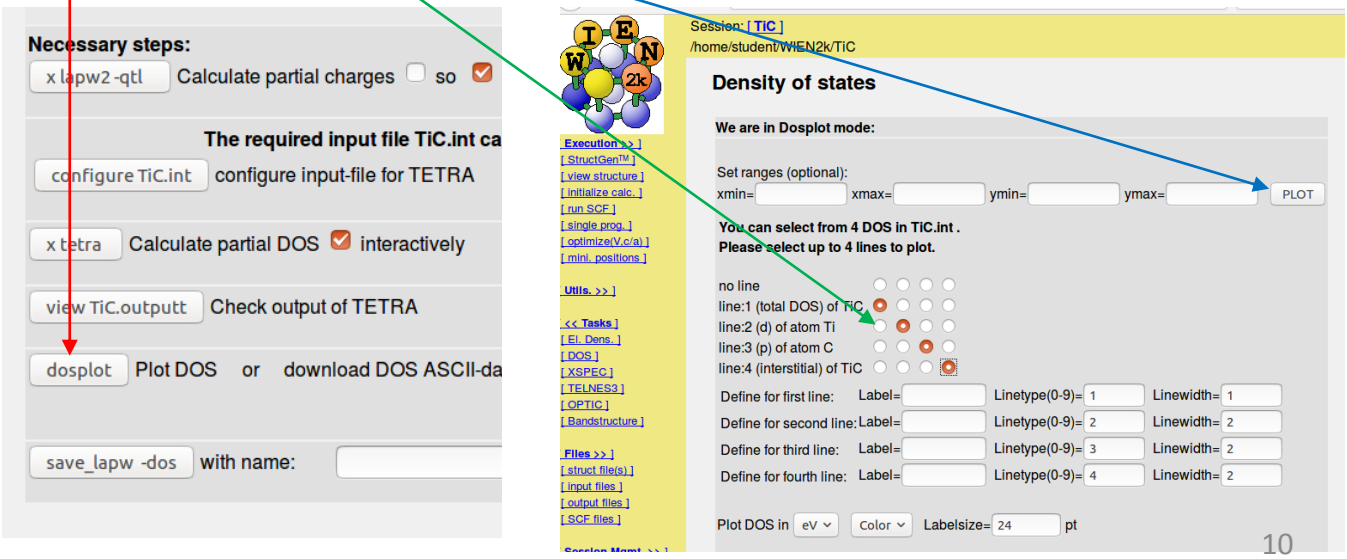
7. x tetra をクリック > continue with DOS をクリック



8. view ファイル名.output をクリック > Save and continue with DOS をクリック

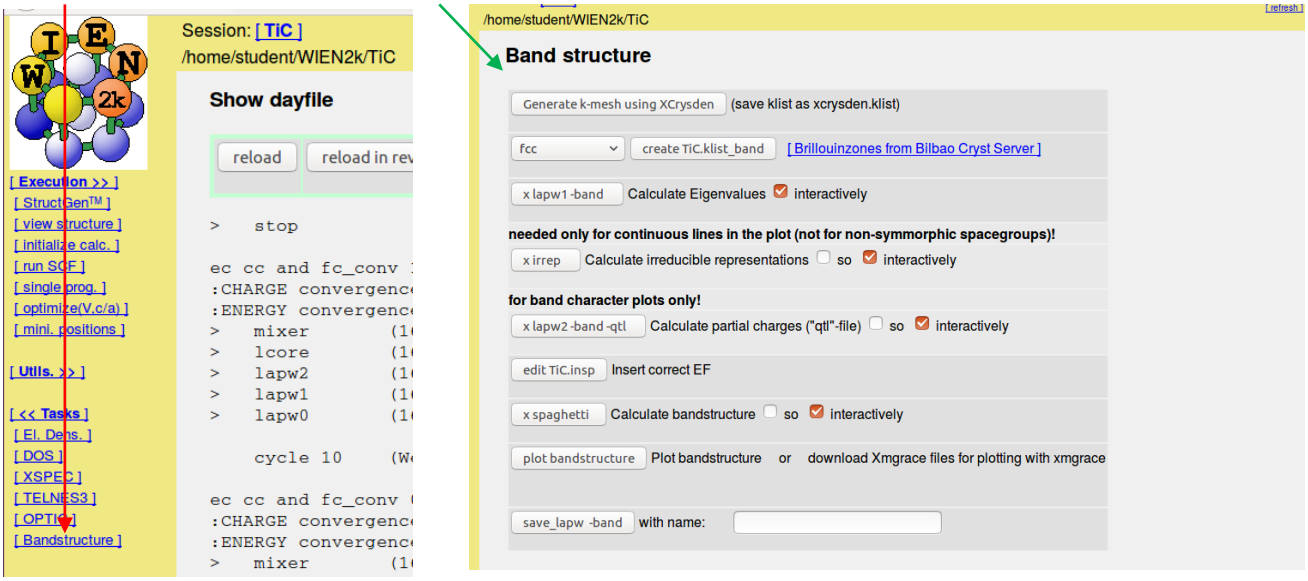


9. dosplotをクリック > 表示する軌道を選択 > plot をクリック > DOSが得られる

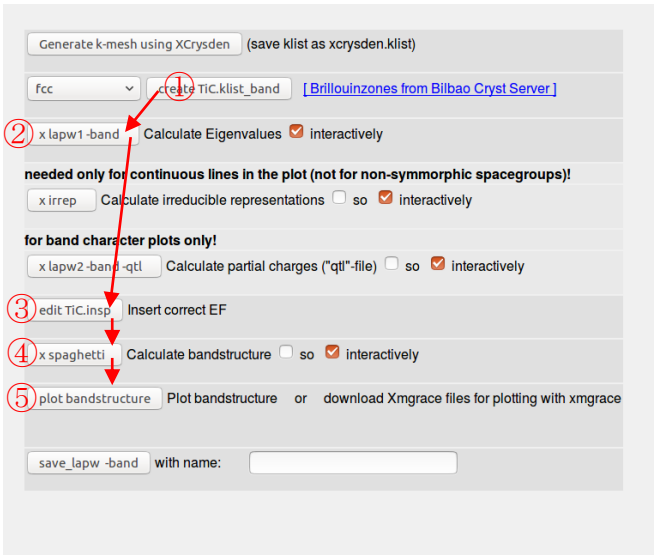


■ GUI(w2web)の操作 -9-（バンド分散の計算）

1. Bandstructure をクリック > バンド分散用の画面が開く

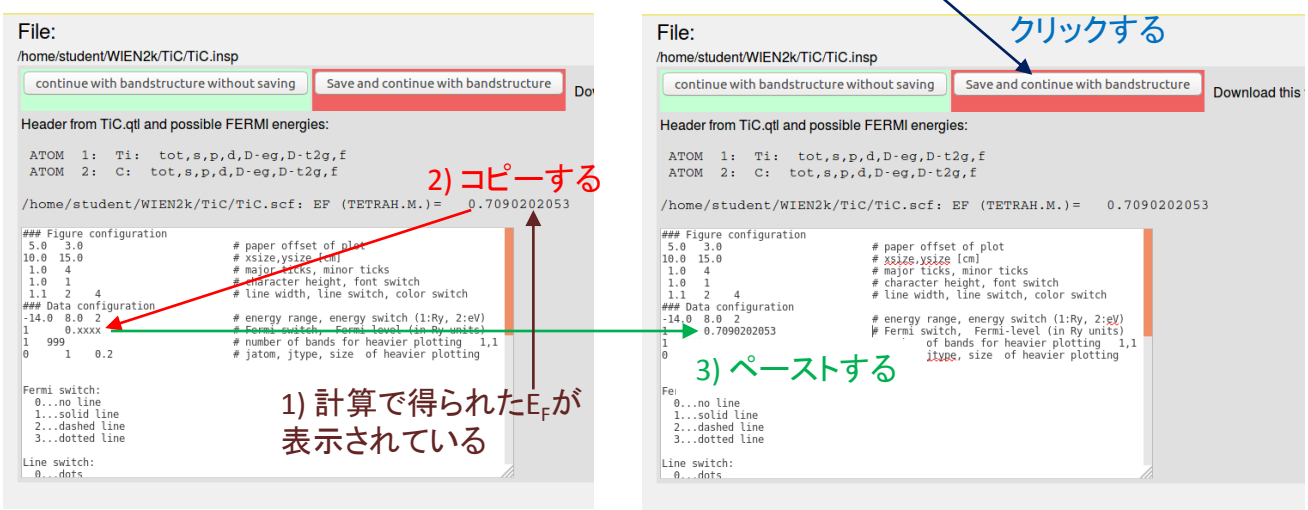


2. 濃い灰色のところを下まで順番に表示されるボタンを押していけばよい（他のTasksも同様）



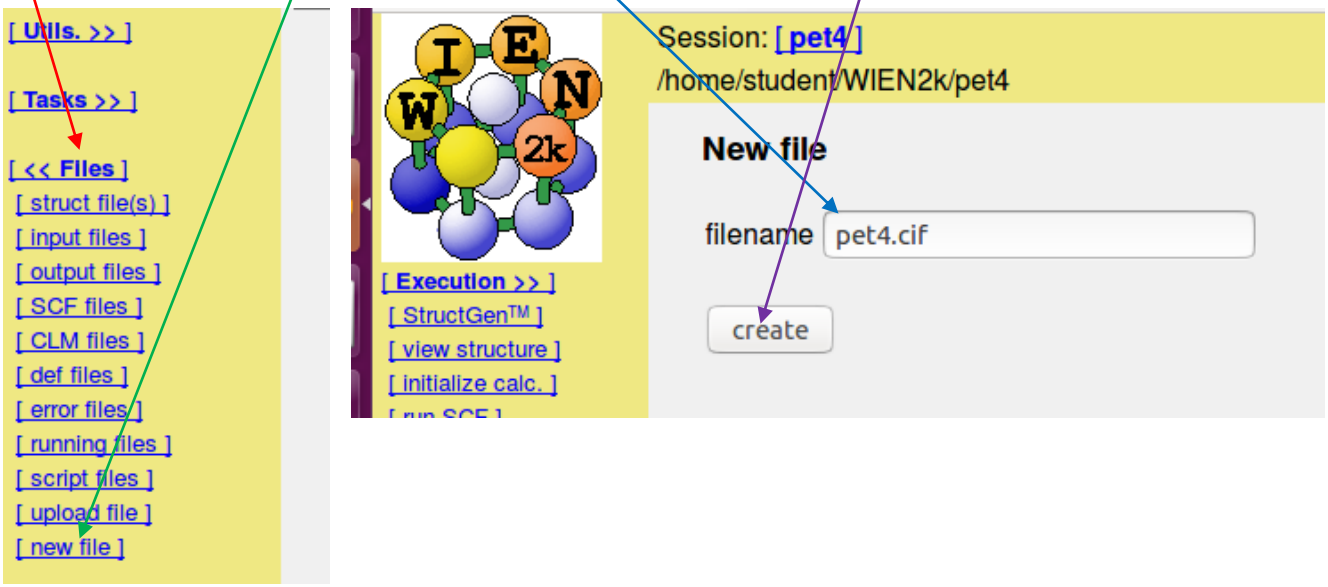
DOSのときと同様に
基本的に表示されるボタンを押していく
③だけは入力が必要なので
下記の3.で具体的に示す

3. ③では0.XXXXのところにE_F（フェルミ準位）を書き入れる > Save continue with bandstructure

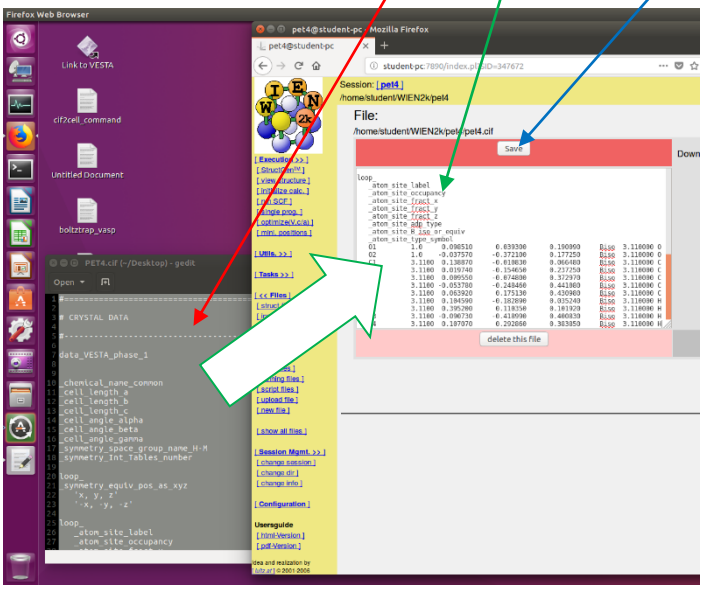


■ 付録：cifファイルの読み取り

1. Files をクリック > new file をクリック > 好きな名称.cif と入力 > create をクリック



2. cifファイルを開いて中身をコピー&ペースト > Save をクリック



cifファイル形式の変更によって
動作しないこともある

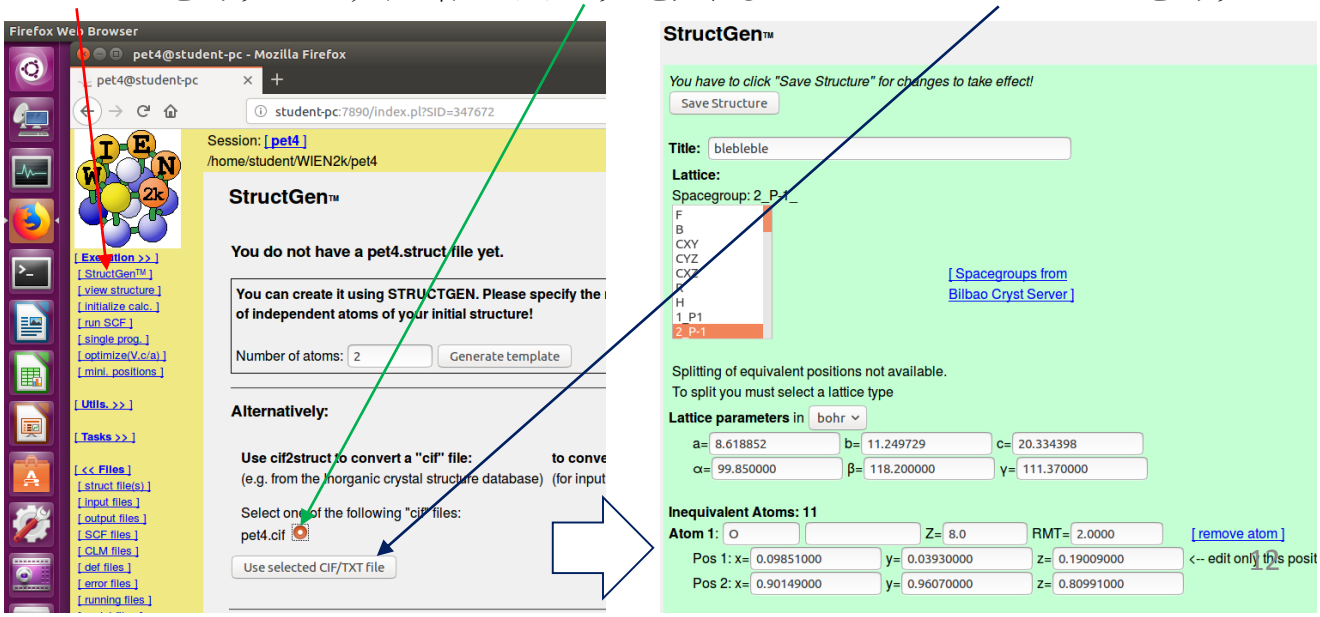
WIEN2k 14 では下記のように変更が必要

_space_group_name_H-M_alt
_space_group_IT_number
_space_group_symop_operation_xyz

↓

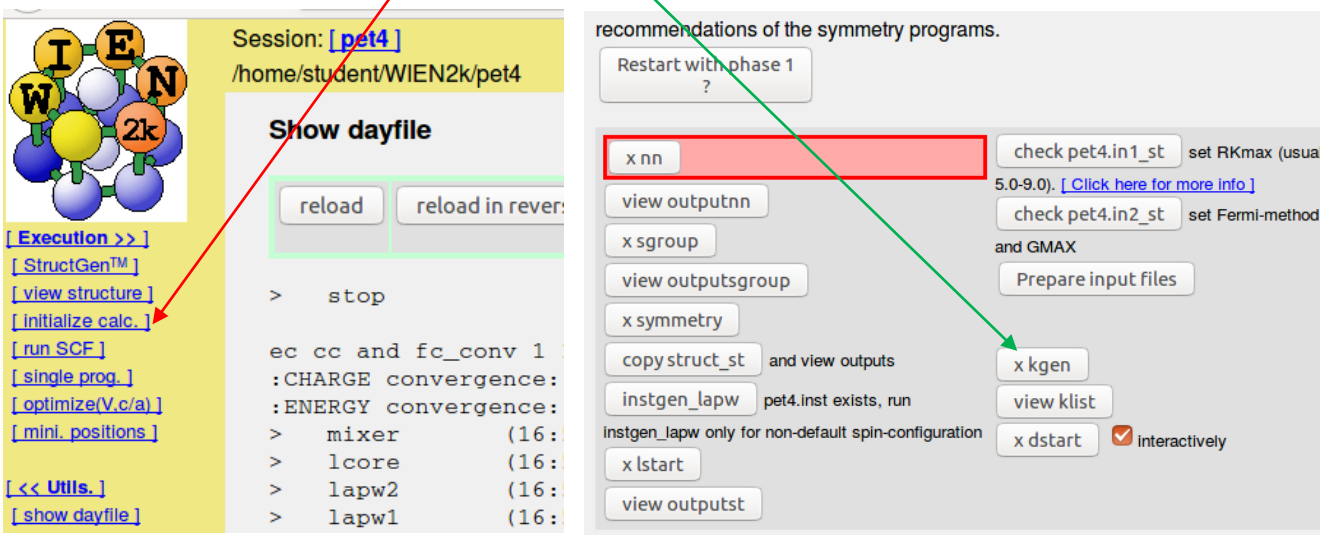
_symmetry_space_group_name_H-M
_symmetry_Int_Tables_number
_symmetry_equiv_pos_as_xyz

3. StructGen™をクリック > ファイル名.cif にチェックを入れる > Use selected CIF/TXT file をクリック

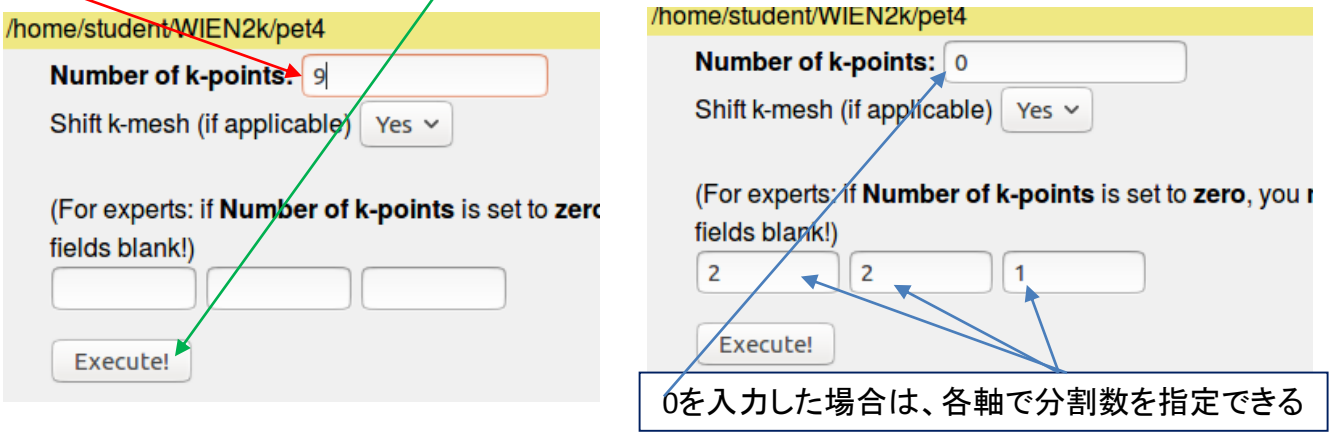


■ 付録：k点を増加させる方法

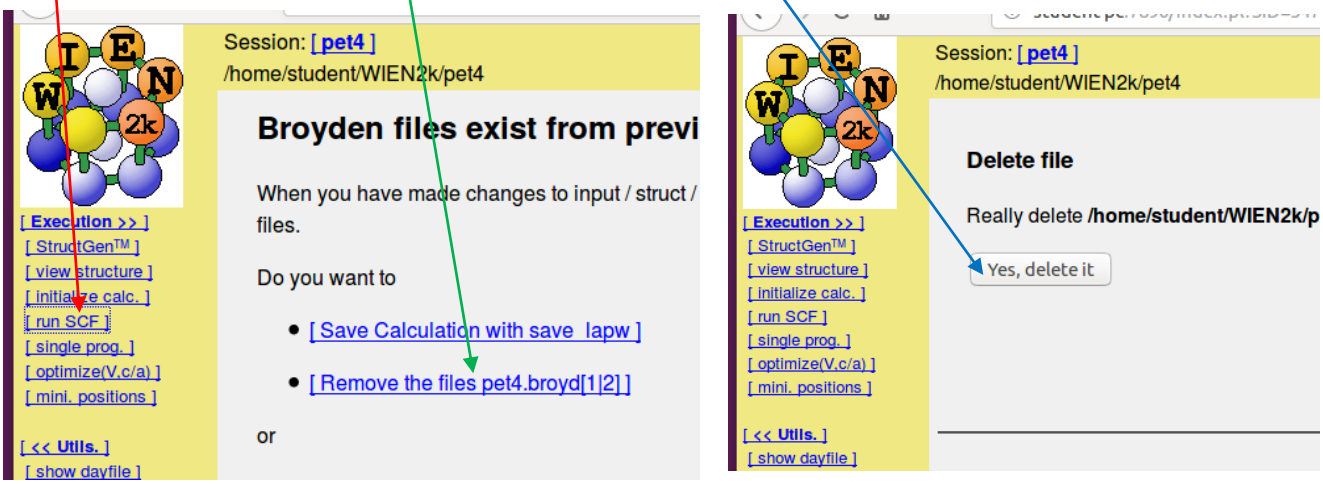
1. run SCF が終了後 > Initialize calc. をクリック > x kgen をクリック



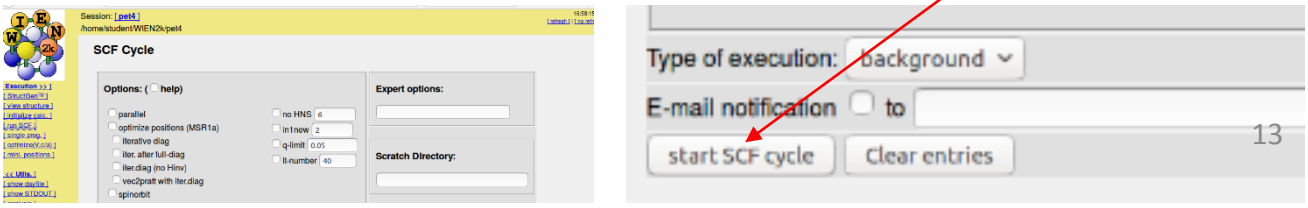
2. k点数を入力する > Execute! をクリック



3. run SCF をクリック > Remove the files …をクリック > Yes, delet it をクリック

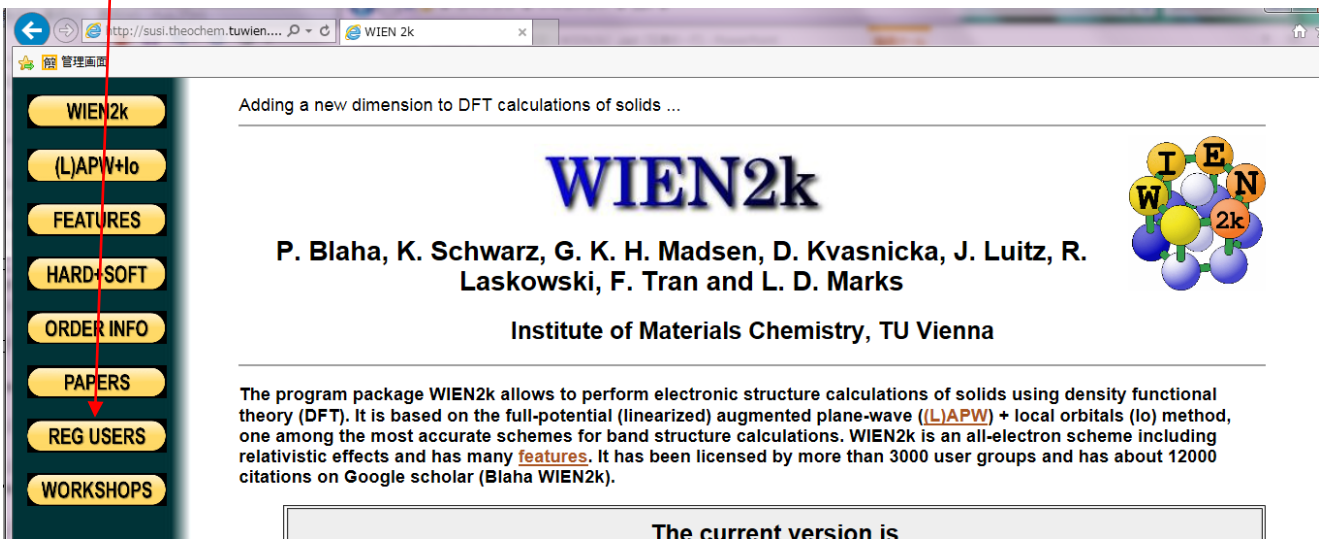


4. 再度 run SCF をクリックすればSCF Cycle の画面が表示される > start SCF cycle をクリックで走る

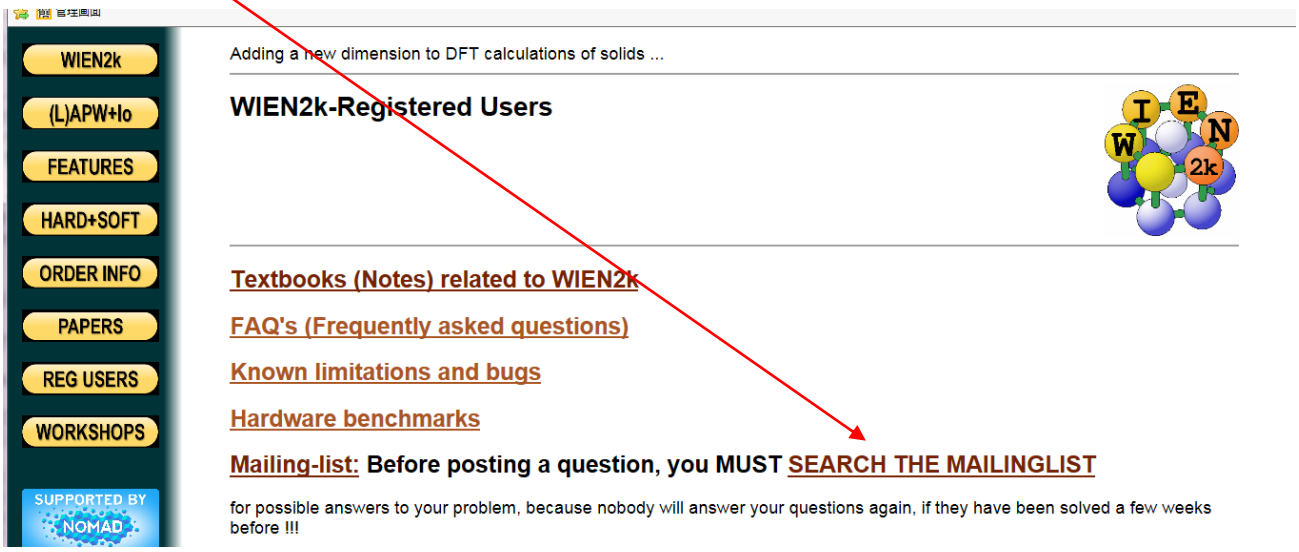


■ 付録: XPSスペクトルの計算についての情報の取得方法

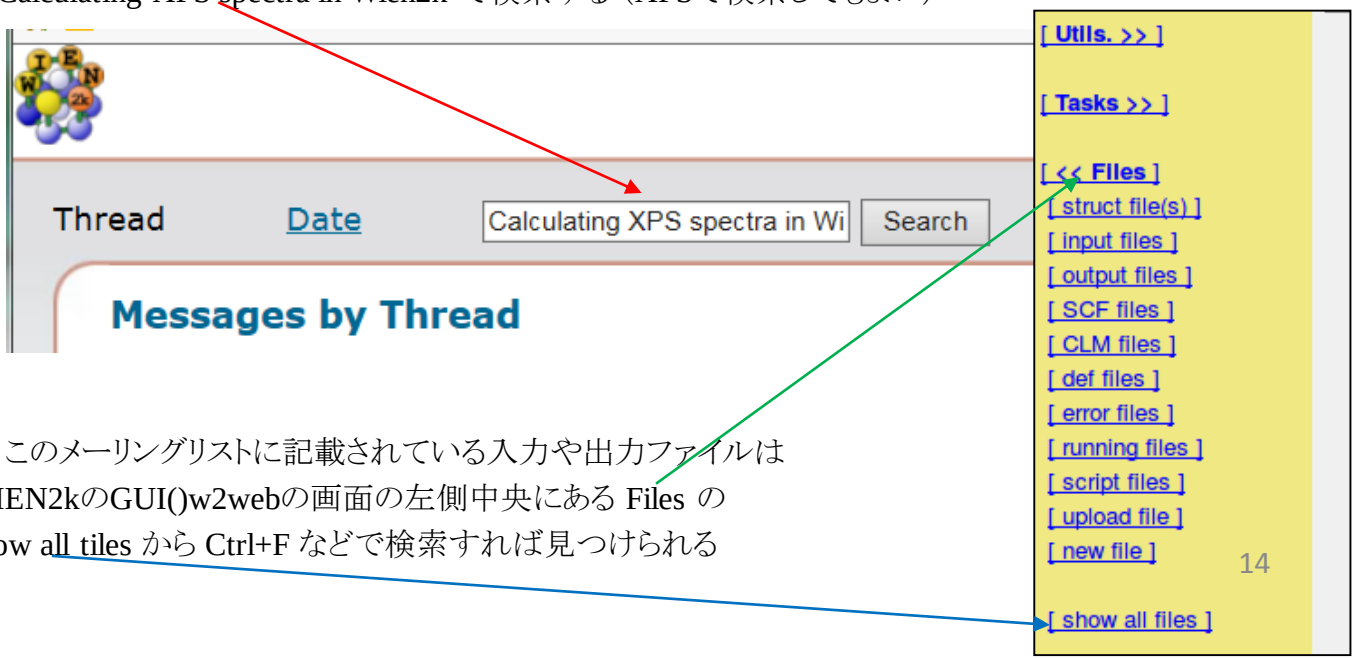
1. REG USERS をクリック



2. SEARCH THE MAILINGLIST をクリック



3. Calculating XPS spectra in Wien2k で検索する（XPSで検索してもよい）



※ このメーリングリストに記載されている入力や出力ファイルは
WIEN2kのGUI()w2webの画面の左側中央にある Files の
show all tiles から Ctrl+F などで検索すれば見つけられる