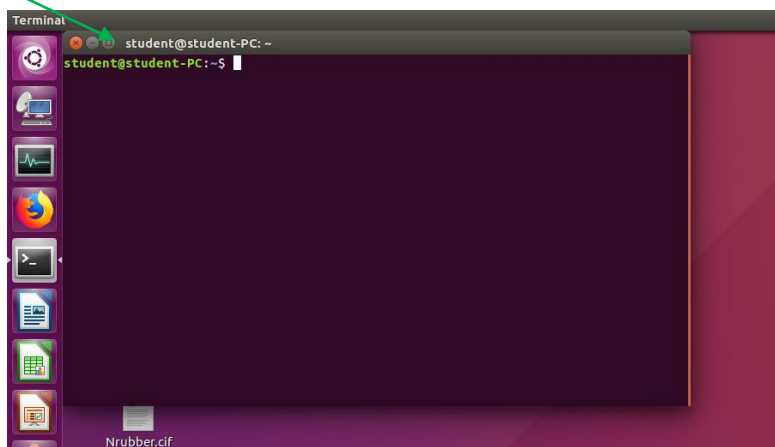
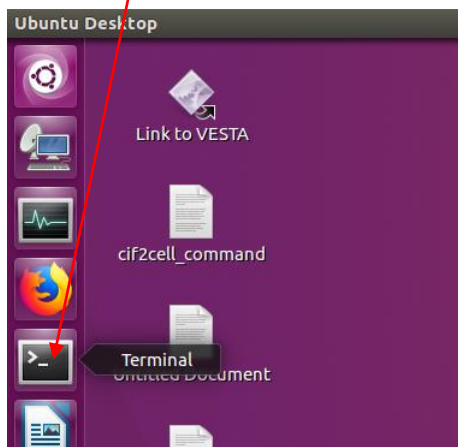


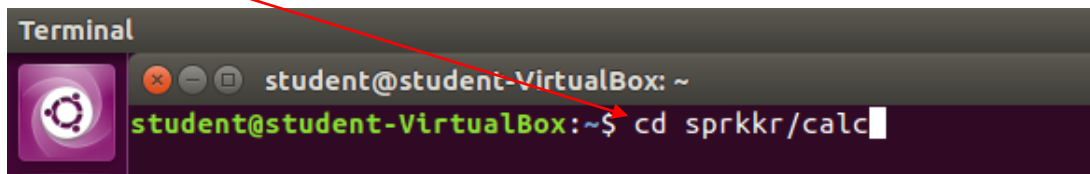
はじめての第一原理計算 (実習)SPR-KKR 操作マニュアル

■ GUI(xband)の起動

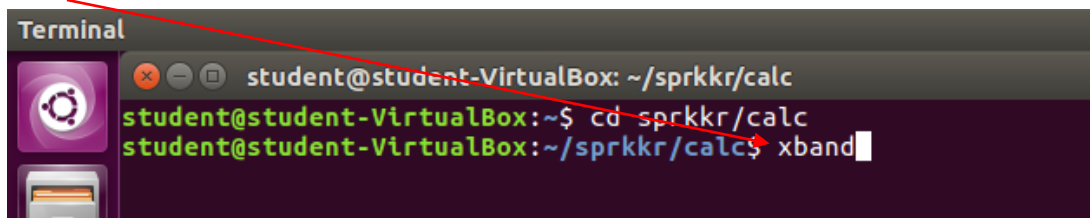
1. Terminal をクリック > Terminal のウィンドウが開く



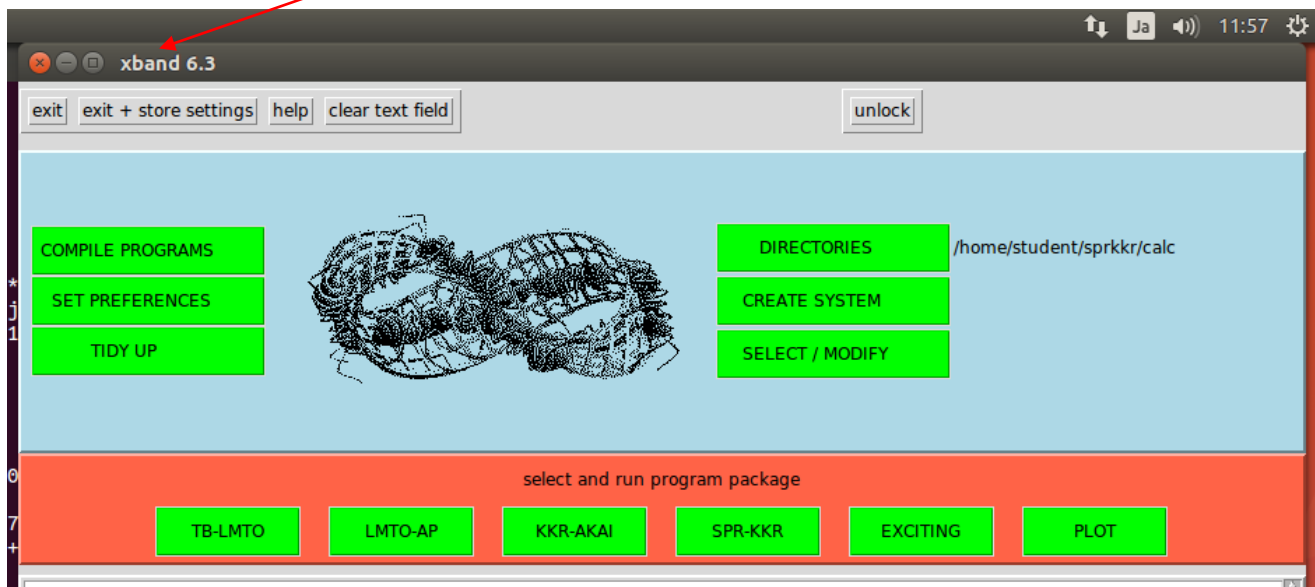
2. Terminal上で `cd sprkkr/calc` と入力して Enter を押す



3. `xband` と入力して Enter を押す



4. SPR-KKR用のGUI (xband)が起動する

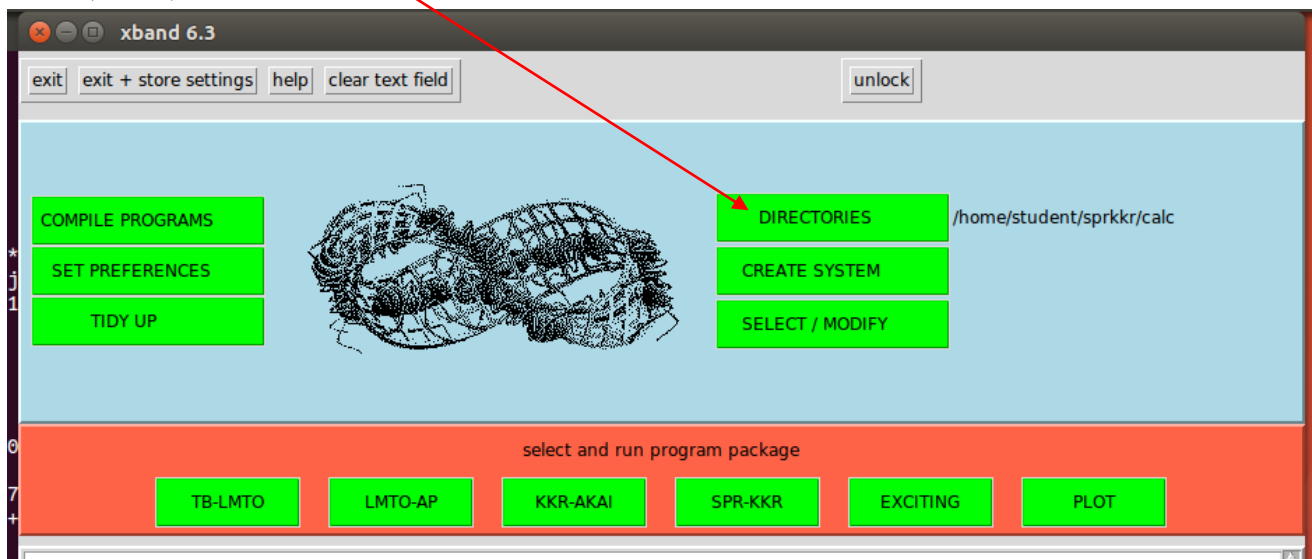


※ 操作中に誤りがある場合はそれを指摘してくれる非常に優れたGUI

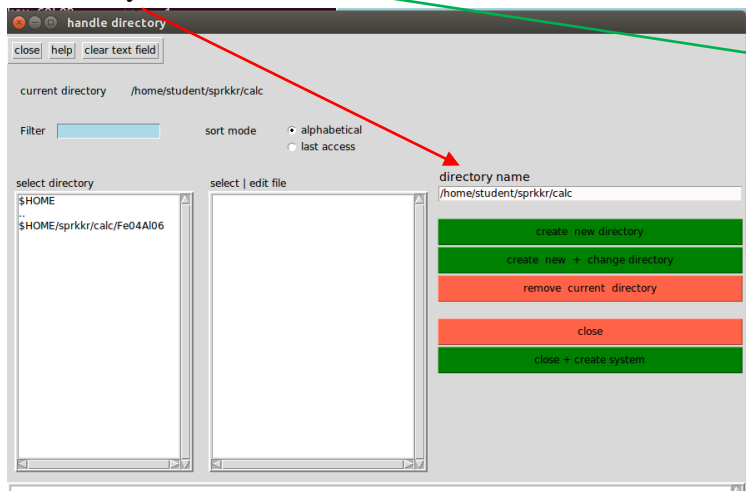
計算途中でエラーが出た場合には、マニュアルを読んだ後に、開発グループに相談するとよい

■ GUI(xband)の操作 -1- (作業場所(フォルダ)の作成)

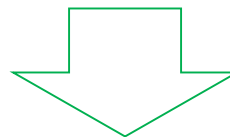
1. GUI(xband)の画面 > DIRECTORIES をクリック



2. directory name の欄で calcの後に /作業フォルダ名 を入力する

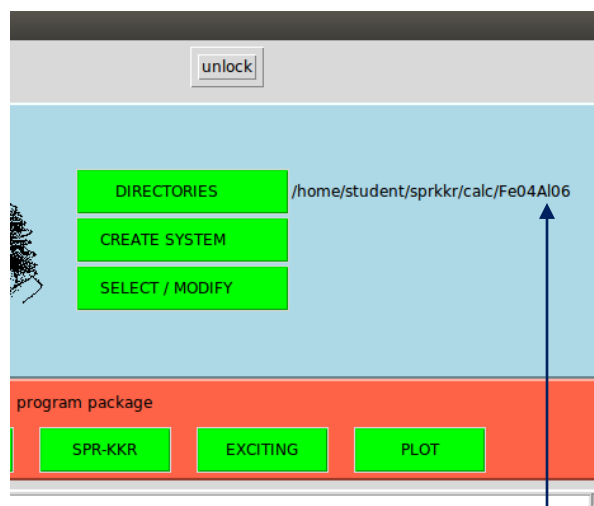
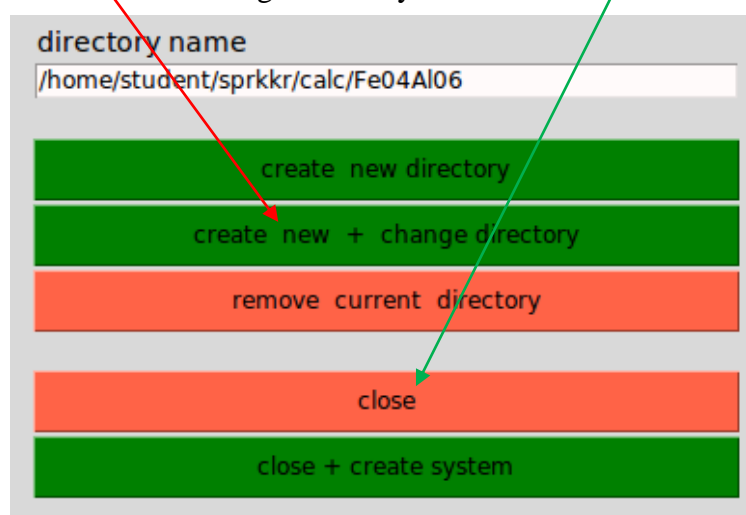


directory name
/home/student/sprkkr/calc



directory name
/home/student/sprkkr/calc/Fe04Al06

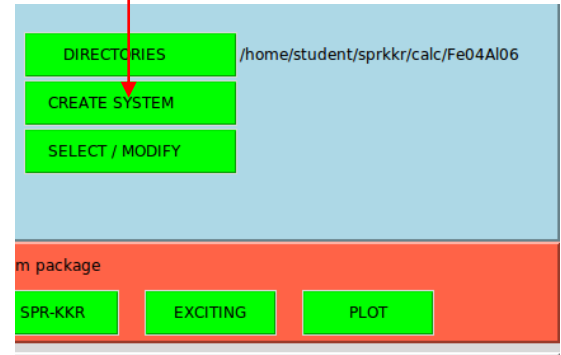
3. create new + change directory をクリック > close をクリック



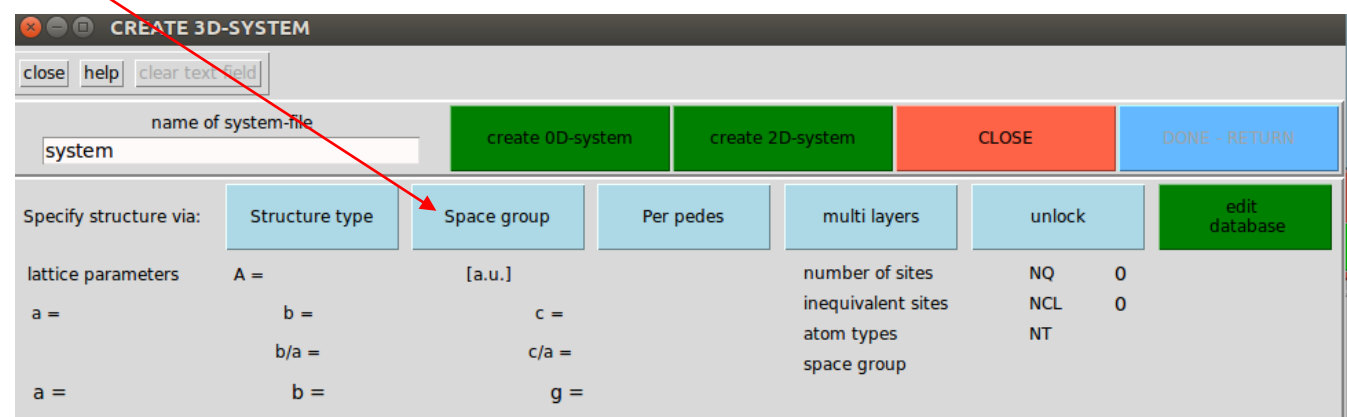
closeをクリックすると最初の画面に自動的に戻る
DIRECTORIES が指定したアドレスになっている

■ GUI(xband)の操作 -2- (結晶構造の入力)

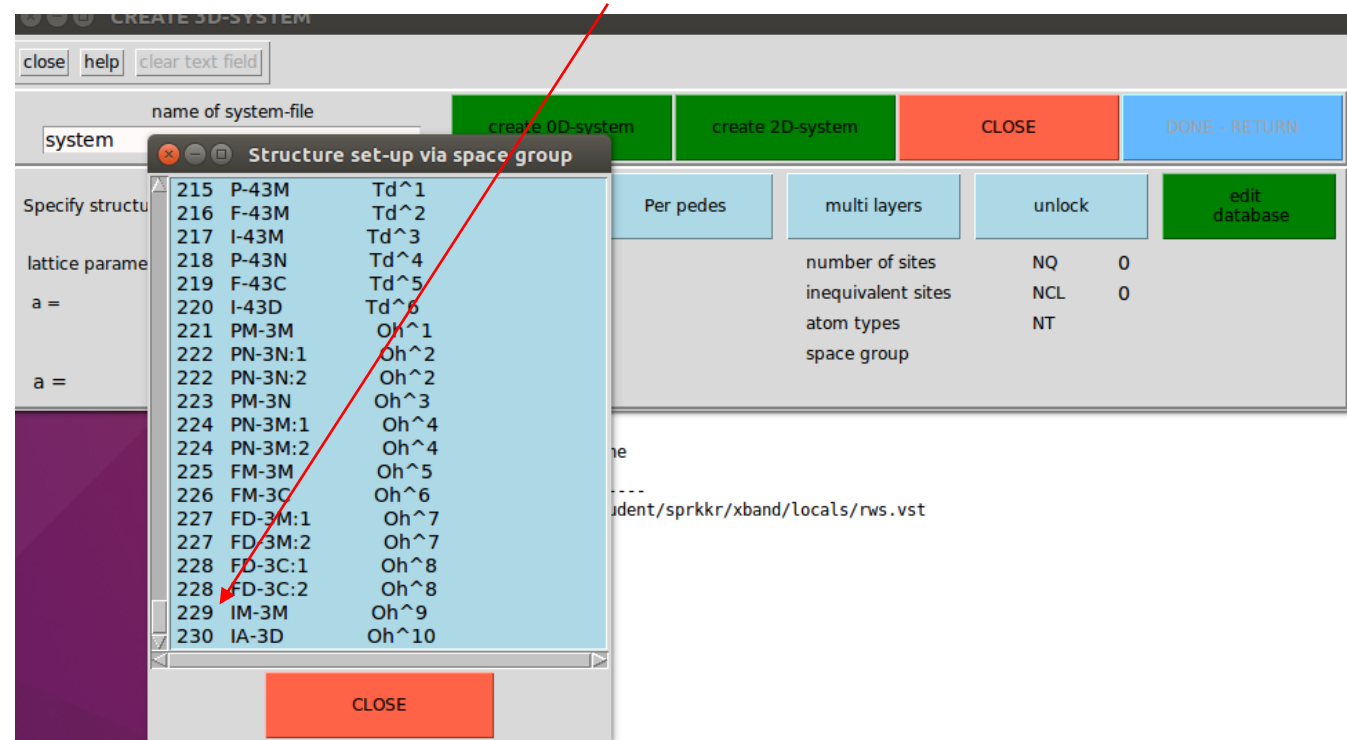
4. CREATE SYSTEM をクリック



5. Space group をクリック



6. 空間群を選択する (今回の例では 空間群 229 の行をクリック)



■ GUI(xband)の操作 -3- (結晶構造の入力)

7. 格子定数(Å)を入力 (今回の例では 2.957 Å) (空間群から推定できる場合は省略できる)

CREATE 3D-SYSTEM

close help clear text field

name of system-file system

create 0D-system create 2D-system CLOSE DONE - RETURN

Specify structure

Bravais lattice: cubic body-centered m3m O_h

supply the lattice parameters and confirm with <RETURN> or [CONFIRM]

CONFIRM

a 2.957 b c

b/a c/a

a 90 b 90 g 90

convert lattice parameters from Angstrom to a.u. if necessary

input OK -- GO ON

CLOSE

8. CONFIRM をクリック > 他の欄が空間群に対応して自動入力される

set lattice parameter

Bravais lattice: cubic body-centered m3m O_h

supply the lattice parameters and confirm with <RETURN> or [CONFIRM]

CONFIRM

a 2.957 b c

b/a c/a

a 90 b 90 g 90

convert lattice parameters from Angstrom to a.u. if necessary

input OK -- GO ON

CLOSE

set lattice parameter

Bravais lattice: cubic body-centered m3m O_h

supply the lattice parameters and confirm with <RETURN> or [CONFIRM]

CONFIRM

a 2.957 b 2.957 c 2.957

b/a 1.0 c/a 1.0

a 90 b 90 g 90

convert lattice parameters from Angstrom to a.u. if necessary

input OK -- GO ON

CLOSE

9. convert lattice ... をクリック > Åが bohr 単位に変換される > input OK - GO ON をクリック

set lattice parameter

Bravais lattice: cubic body-centered m3m O_h

supply the lattice parameters and confirm with <RETURN> or [CONFIRM]

CONFIRM

a 2.957 b 2.957 c 2.957

b/a 1.0 c/a 1.0

a 90 b 90 g 90

input OK -- GO ON

CLOSE

set lattice parameter

Bravais lattice: cubic body-centered m3m O_h

supply the lattice parameters and confirm with <RETURN> or [CONFIRM]

CONFIRM

a 5.58791974822787 b 5.58791974822787 c 5.58791974822787

b/a 1.0 c/a 1.0

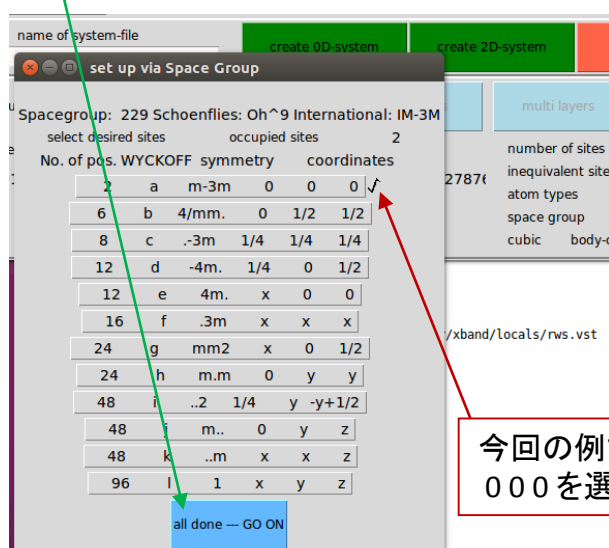
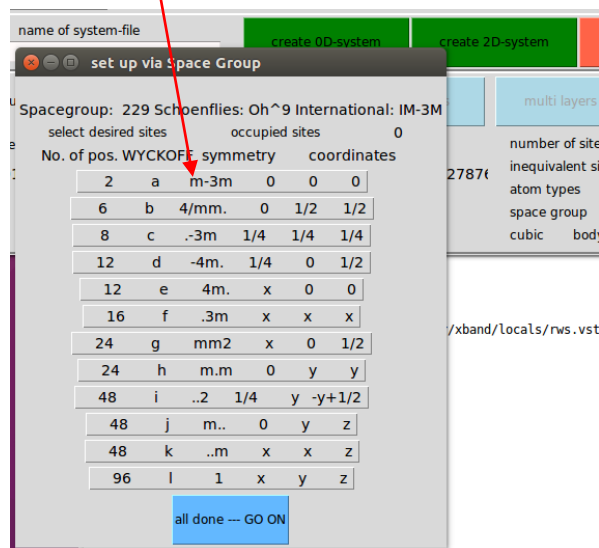
a 90 b 90 g 90

input OK -- GO ON

CLOSE

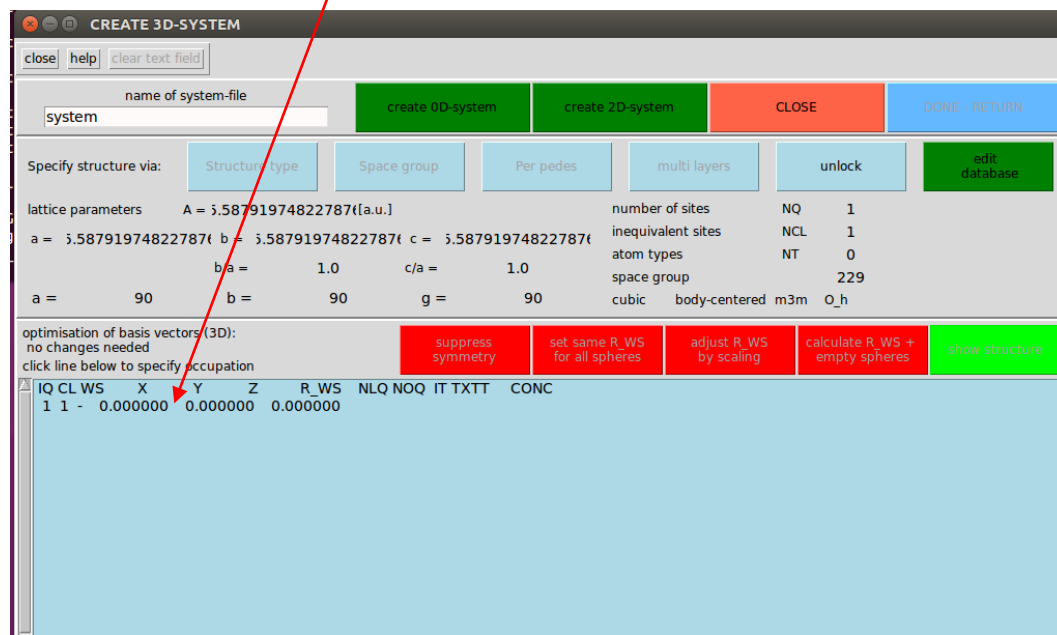
■ GUI(xband)の操作 -4- (結晶構造の入力)

10. 原子位置を選択 (何度も選択可能) > 全部入力後 all done – GO ON をクリック

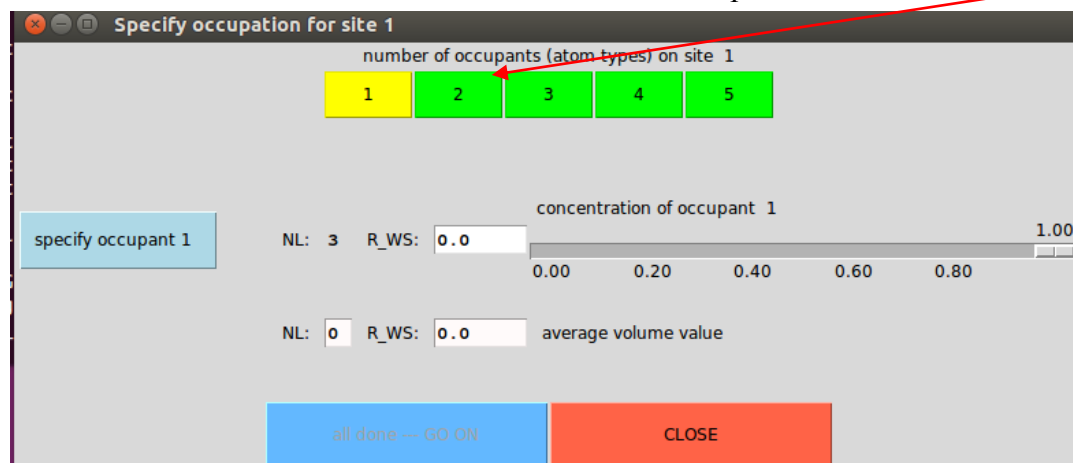


今回の例では
0 0 0を選択

11. 下の青枠の中の原子座標のある行をクリック (複数行ある時はこれを各行で繰り返す)

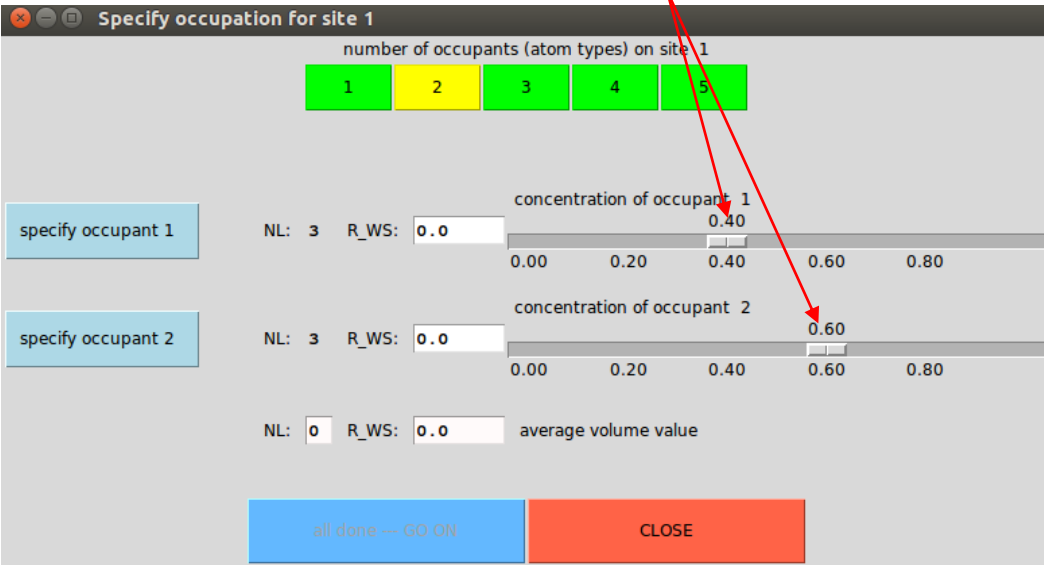


12. 1のサイトに複数の元素がある場合は number of occupants ... でその元素の数をクリックする

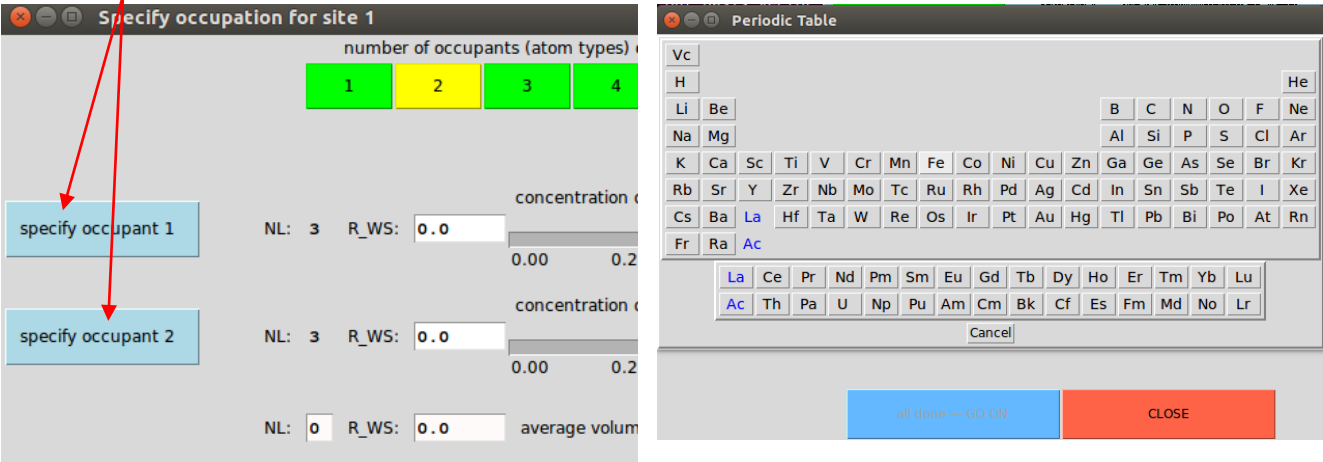


■ GUI(xband)の操作 -5- (結晶構造の入力)

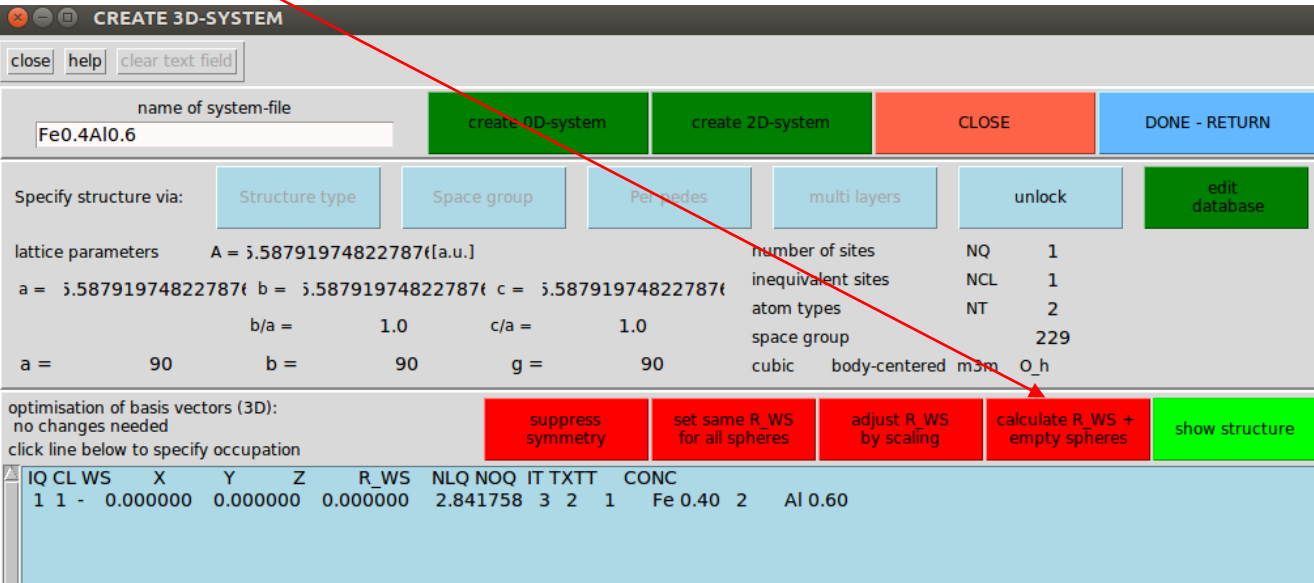
13. Concentration of occupant のバーを動かして濃度比を指定する



14. specify occupant をクリック > 周期律表が出るので元素を選択 (今回の例では1がFe, 2がAl)



15. calculate R_WS + empty spheres をクリック



※ 原子番号0の元素を大きな隙間に配置した方が精度が良くなると考えられるが、原子番号0を配置しない方がWIEN2kの結果と同じDOSが得られることがある

■ GUI(xband)の操作 -6- (結晶構造の入力)

16. OK – RUN をクリック (add empty sphere をNOにした方がWIEN2kのDOSと近くなることもある)

the Wigner-Seitz radii will be adjusted according to a guess for the charge density

add empty spheres ☒ YES ☐ NO

r_min (ES) 1.20

r_max (ES) 2.50

CLOSE OK – RUN

optimisation of basis vectors (3D): no changes needed

click line below to specify occupation

IQ	CL	WS	X	Y	Z	R_WS	NLQ	NOQ	IT	TXTT	CONC
1	1	-	0.000000	0.000000	0.000000	2.841758	3	2	1	Fe	0.40 2

Al 0.60

suppress symmetry set same R_WS for all spheres adjust R_WS by scaling calculate R_WS + empty spheres show structure

17. show structure をクリック > unit cell repeated within ... > run visualizer ...

unit cell repeated along primitive axes

N1 1

N2 1

N3 1

unit cell repeated within rectangular box

LX 1.0

LY 1.0

LZ 1.0

cluster around selected atomic site

IQCNTR 1

NSHLCLU 2

CLURAD 0.0

surface including selected atomic site

IQSURF 1

h 0

k 0

L1 1.0

L2 4.0

L3 4.0

orient ☒ up ☐ down

Visualizer: ☐ XCrySDen ☒ rasmol ☐ Jmol ☐ dataexplorer

scale Wigner-Seitz radius 0.40

scale object 1.0

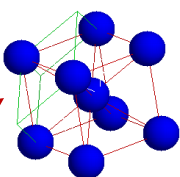
☐ show site labels ☒ show unit cell ☒ show cube ☒ show axis ☒ show empty spheres color of atomic spheres ☐ atomic number ☒ atom type

run visualizer (set up of input may take a while)

CLOSE

18. 結晶構造が表示される > ×で閉じる > DONE – RETURN をクリック

RasMol - Fe0.4Al0.6_xband.pdb



緑はプリミティブセル

DONE - RETURN

Per pedes multi layers unlock edit database

number of sites NQ 1

inequivalent sites NCL 1

atom types NT 2

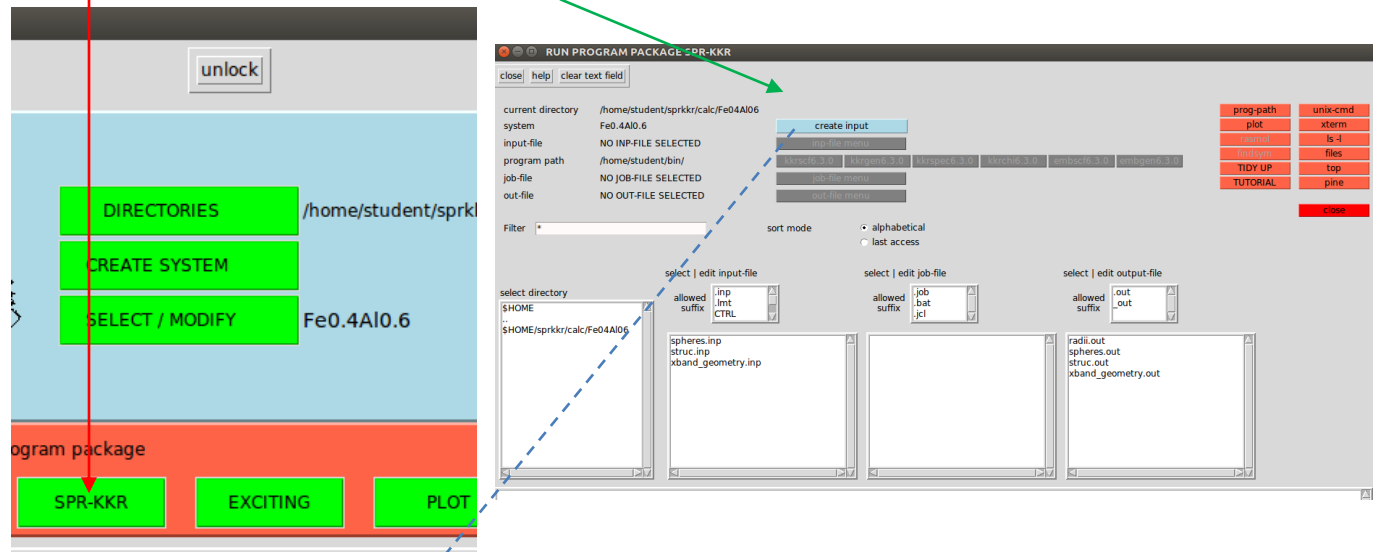
space group 229

cubic body-centered m3m O_h

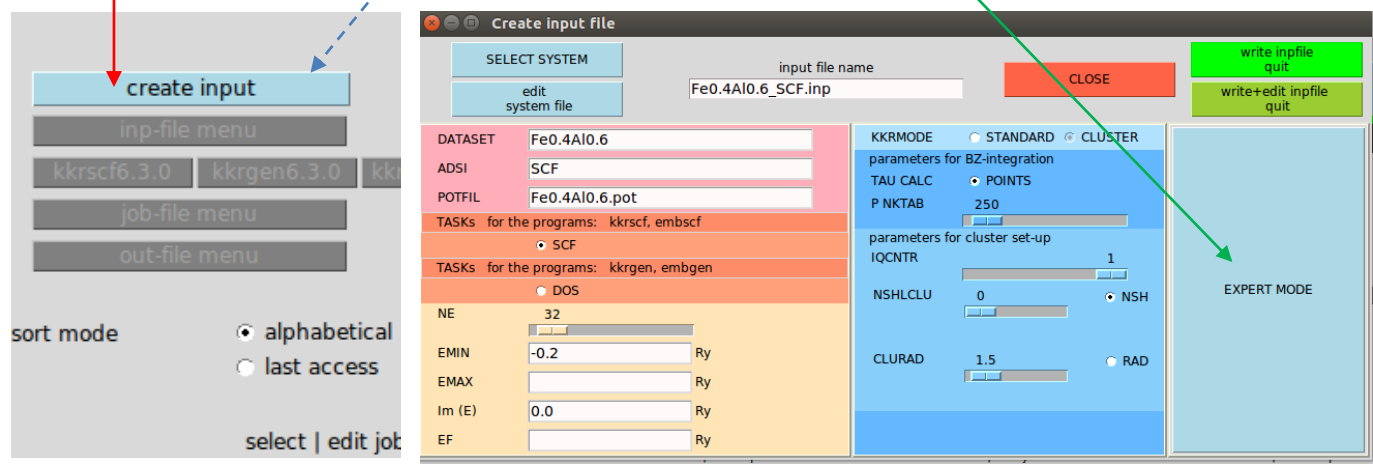
suppress symmetry set same R_WS for all spheres adjust R_WS by scaling calculate R_WS + empty spheres show structure

GUI(xband)の操作 -7- (計算条件の設定)

1. SPR-KKR をクリック > SPR-KKR用の画面が開く



2. create input をクリック > 計算条件を指定する画面が表示される > EXPERT MODE をクリック

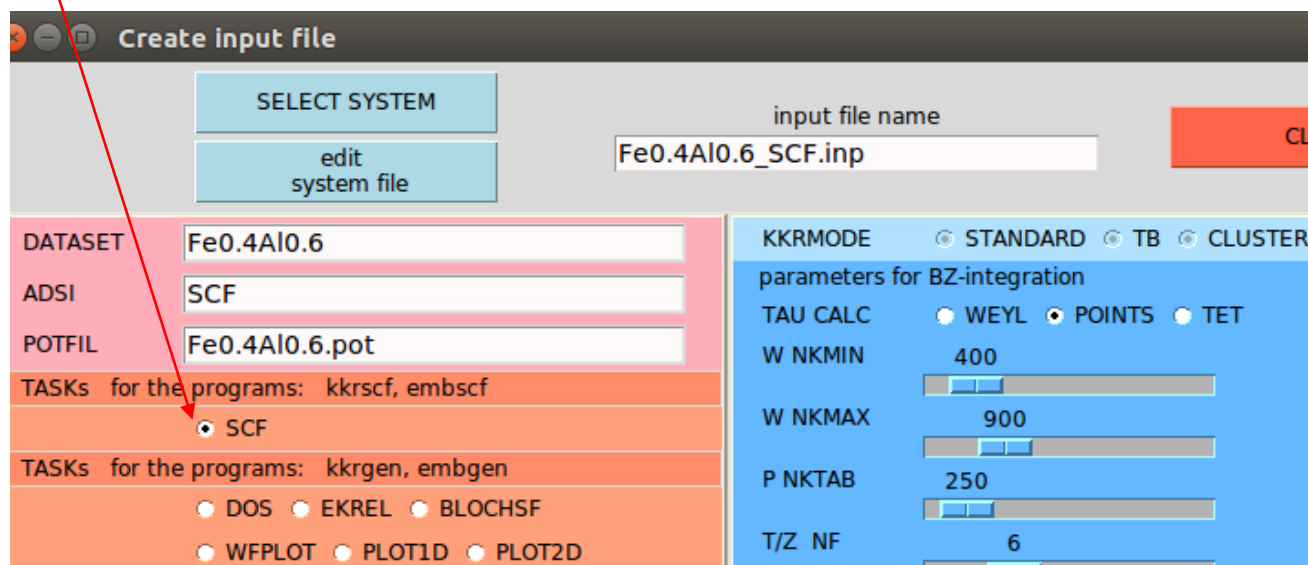


3. EXPERT MODE の画面が開く

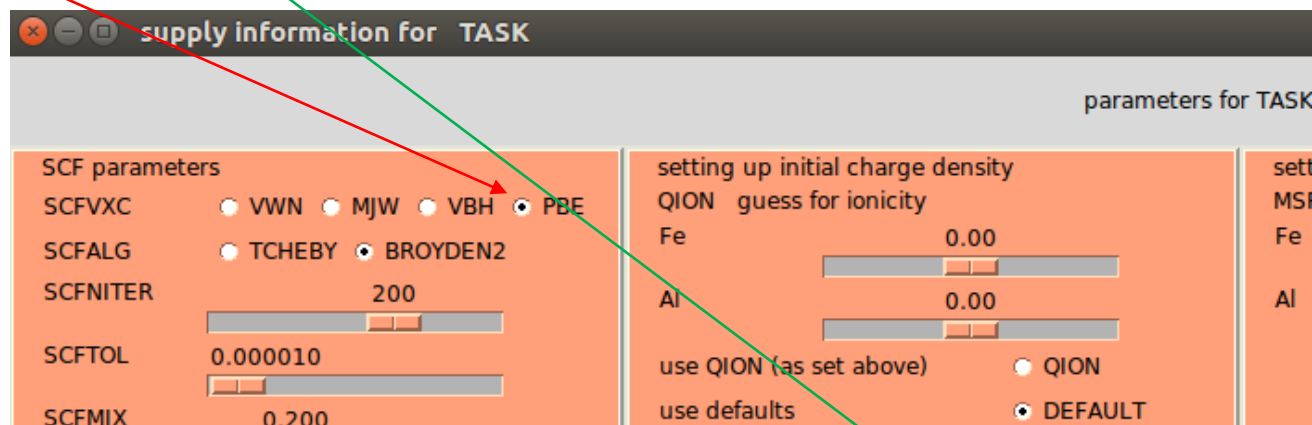


■ GUI(xband)の操作 -8- (計算条件の設定)

4. SCF をクリック



5. PBE を選択 > RETURN をクリック

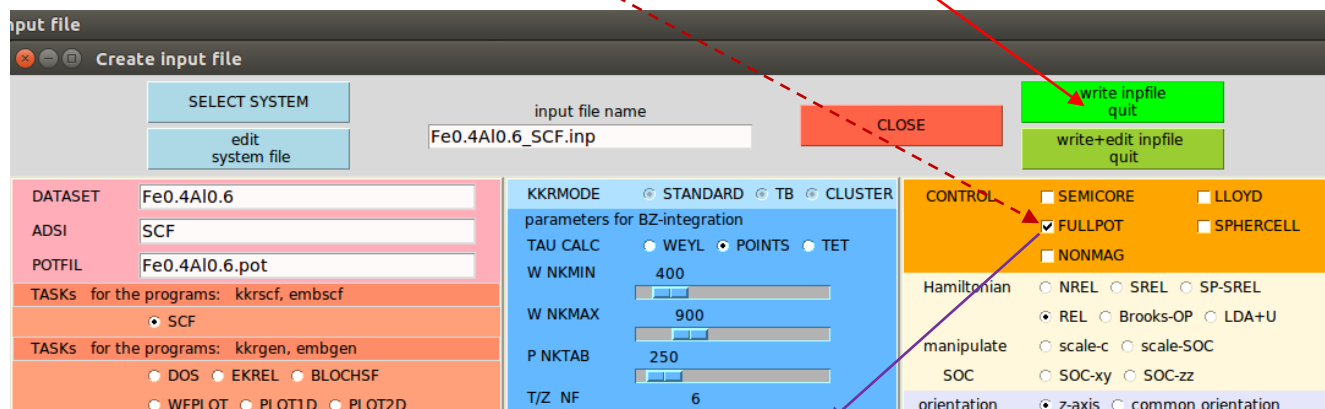


LDA = VWN, MJW and VBH
(どれもほぼ同じ結果を与える)

GGA = PBE

RETURN

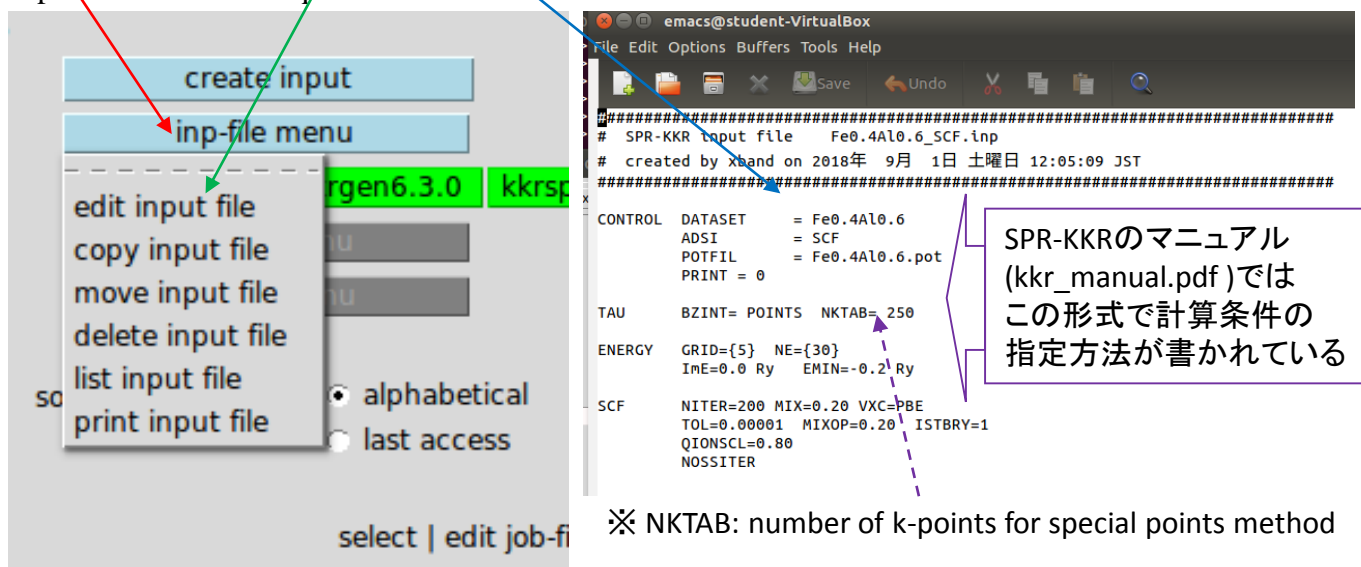
6. (フルポテンシャルの計算をする場合は FULLPOT を選択) write infile quit をクリック



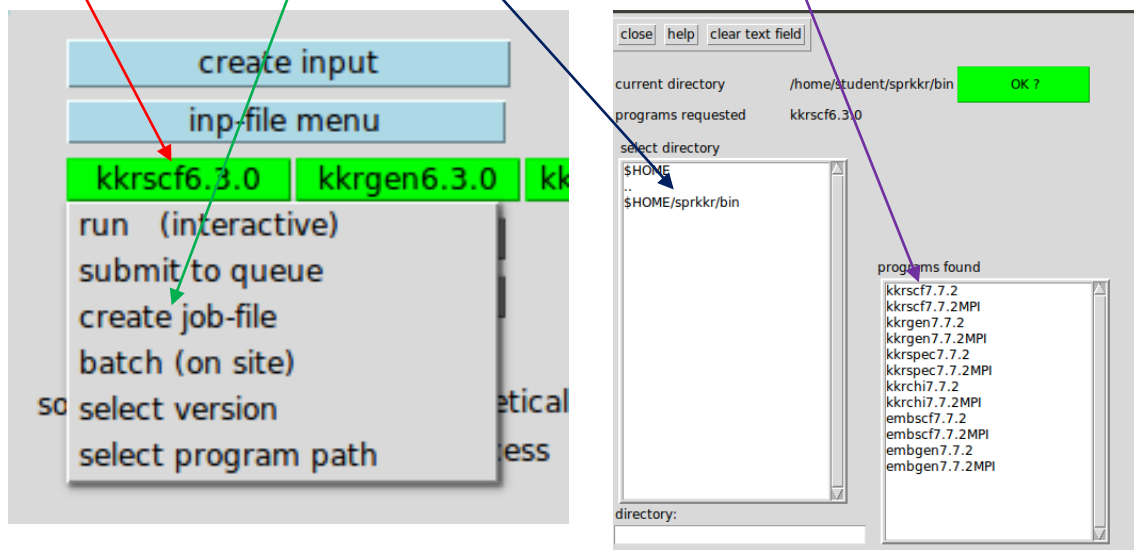
フルポテンシャル計算は計算機の実環境によって動作しなかったりする
SCF や DOS 計算までは可能なことが多い

■ GUI(xband)の操作 -9- (計算条件の設定)

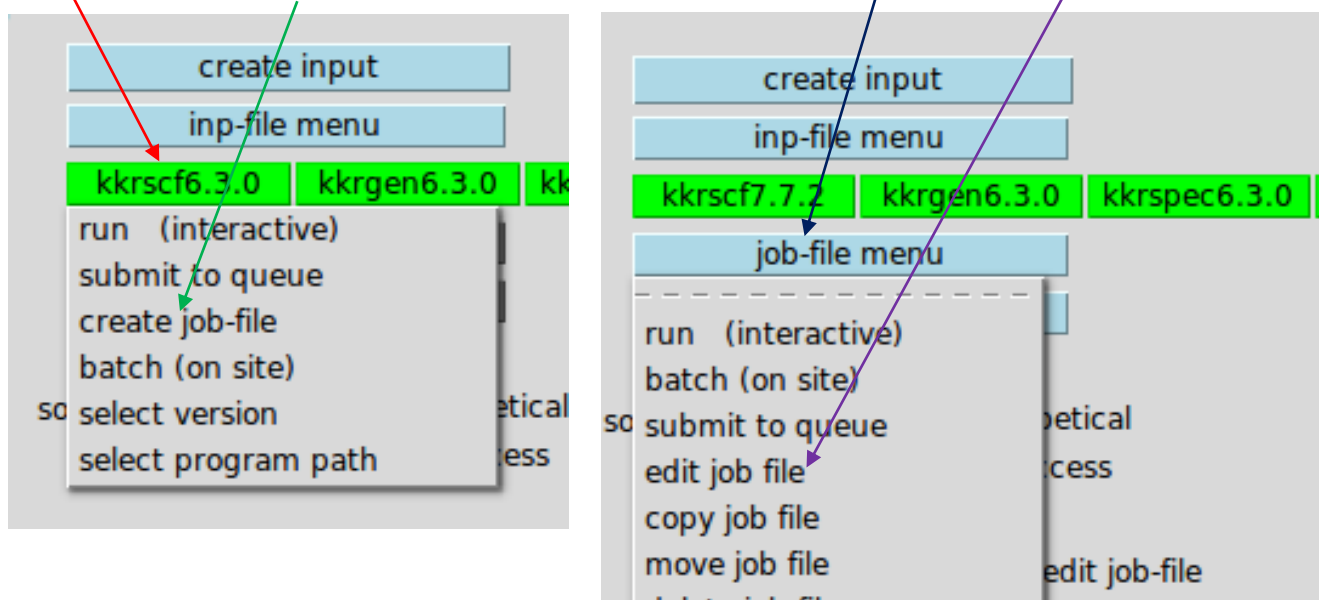
7. inp-file menu > edit input file > 入力ファイルが表示される



8. kkrscf6.3.0 > create job-file > select directory を変えて kkrscfX.Y.Z (X, Y, Zは数値)を選択

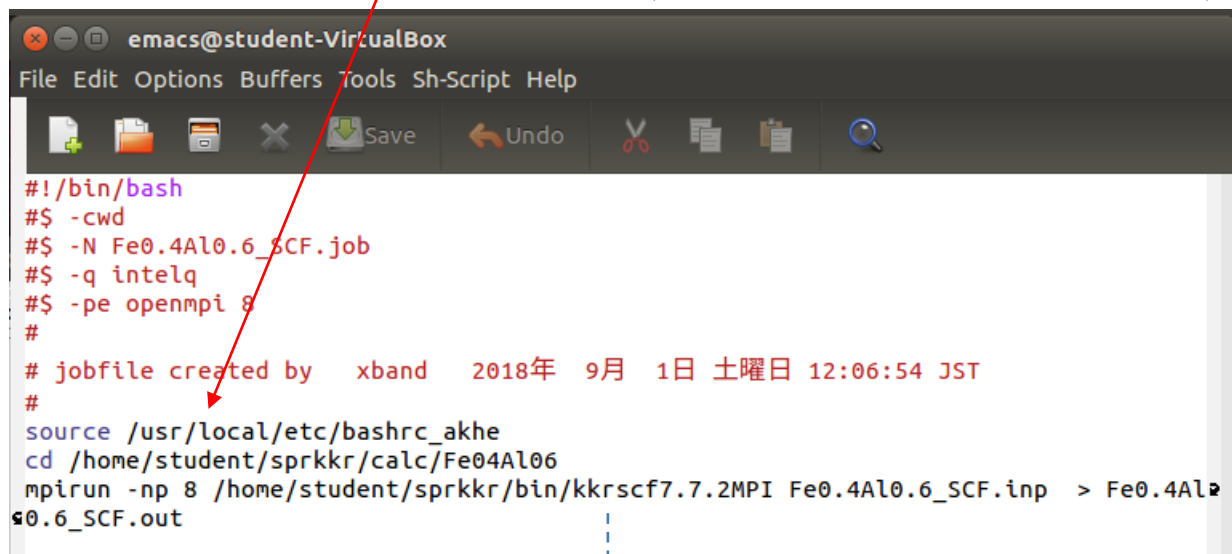


9. `kkrschX.Y.Z > create job-file` (jobファイルが作成される) `> job-file menu > edit job file` を選択



■ GUI(xband)の操作 -10- (並列数の設定と計算の実行)

10. 計算を走らせるための環境設定が表示される (行の初めに#がある行はコメントの行となる)



```
emacs@student-VirtualBox
File Edit Options Buffers Tools Sh-Script Help

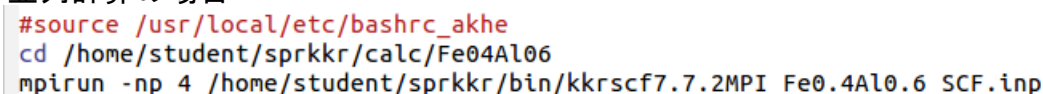
#!/bin/bash
#$ -cwd
#$ -N Fe0.4Al0.6_SCF.job
#$ -q intelq
#$ -pe openmpi 8
#
# jobfile created by xband 2018年 9月 1日 土曜日 12:06:54 JST
#
source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkrr/calc/Fe04Al06
mpirun -np 8 /home/student/sprkkrr/bin/kkrscf7.7.2MPI Fe0.4Al0.6_SCF.inp > Fe0.4Al0.6_SCF.out
```

11. source ... からの部分を書き換える



```
source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkrr/calc/Fe04Al06
mpirun -np 8 /home/student/sprkkrr/bin/kkrscf7.7.2MPI Fe0.4Al0.6_SCF.inp > Fe0.4Al0.6_SCF.out
```

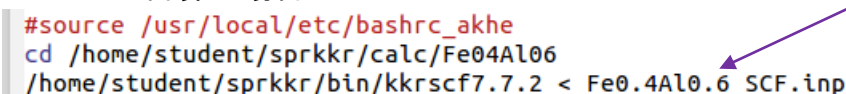
並列計算の場合



```
#source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkrr/calc/Fe04Al06
mpirun -np 4 /home/student/sprkkrr/bin/kkrscf7.7.2MPI Fe0.4Al0.6_SCF.inp
```

並列数 (この例では4 CPUで計算)

1 CPUでの計算の場合

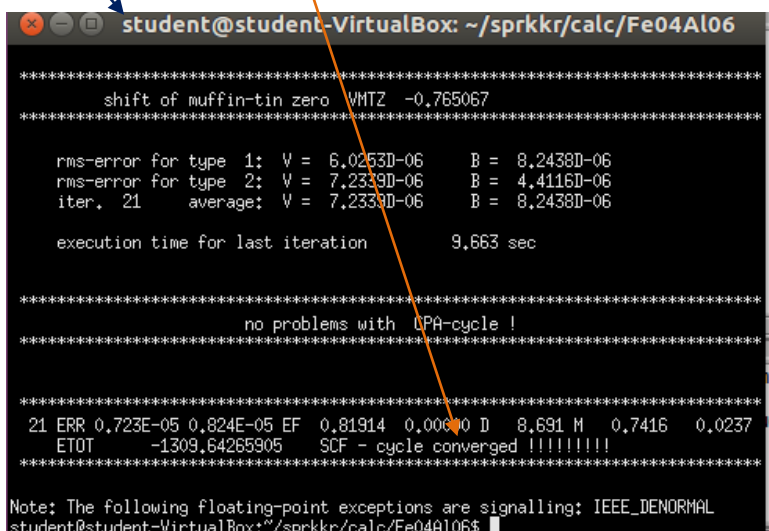
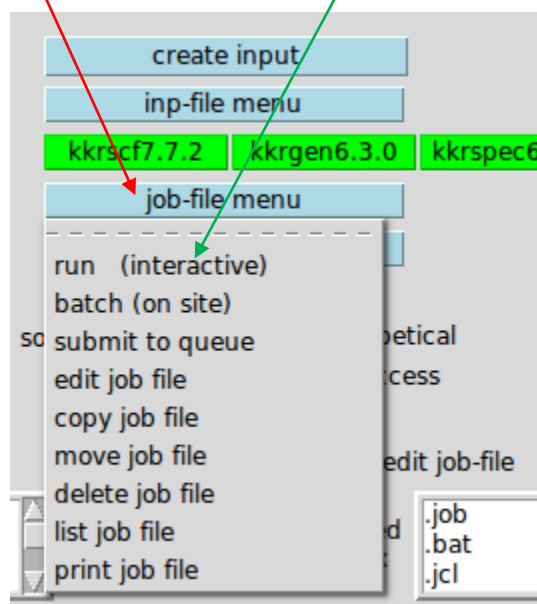


```
#source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkrr/calc/Fe04Al06
/home/student/sprkkrr/bin/kkrscf7.7.2 < Fe0.4Al0.6_SCF.inp
```

入力ファイル名
自動的に記述される

今回の例では
Fe0.4Al0.6_SCF.inp

12. job-file menu > run (interactive) をクリック > 計算が走る > cycle converged で計算終了



```
student@student-VirtualBox: ~/sprkkrr/calc/Fe04Al06

*****
shift of muffin-tin zero WMTZ -0.765067
*****

rms-error for type 1: V = 6.0253D-06 B = 8.2438D-06
rms-error for type 2: V = 7.2339D-06 B = 4.4116D-06
iter. 21 average: V = 7.2339D-06 B = 8.2438D-06

execution time for last iteration 9.663 sec

*****
no problems with CPA-cycle !
*****

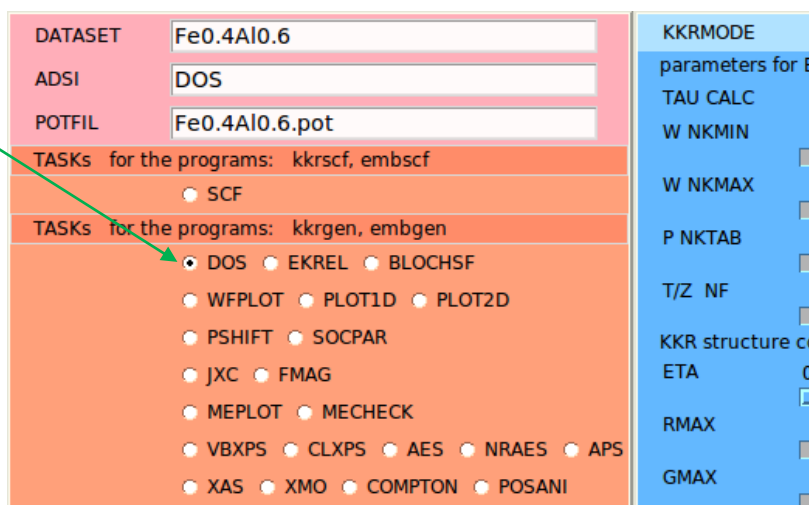
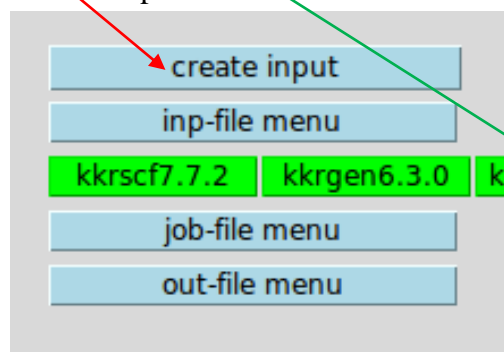
21 ERR 0.723E-05 0.824E-05 EF 0.81914 0.00000 D 8.691 M 0.7416 0.0237
ETOT -1309.64265905 SCF - cycle converged !!!!!!!

Note: The following floating-point exceptions are signalling: IEEE_DENORMAL
student@student-VirtualBox:~/sprkkrr/calc/Fe04Al06$
```

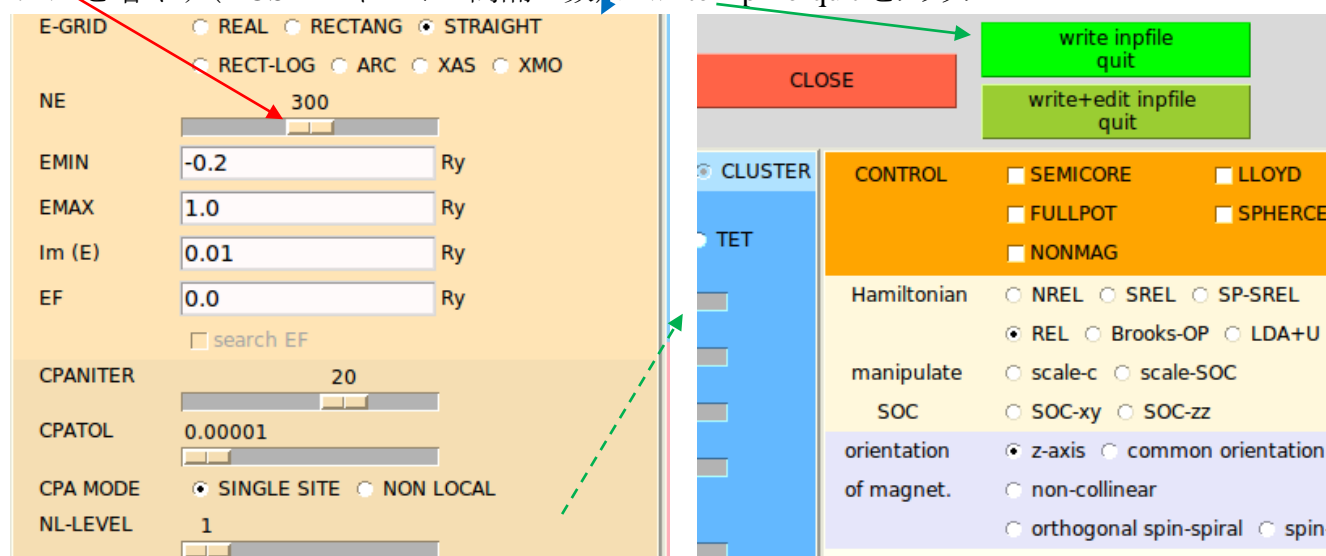
DOSやXPSなどの計算はほぼこの手順と同じ

■ GUI(xband)の操作 -11- (DOS計算)

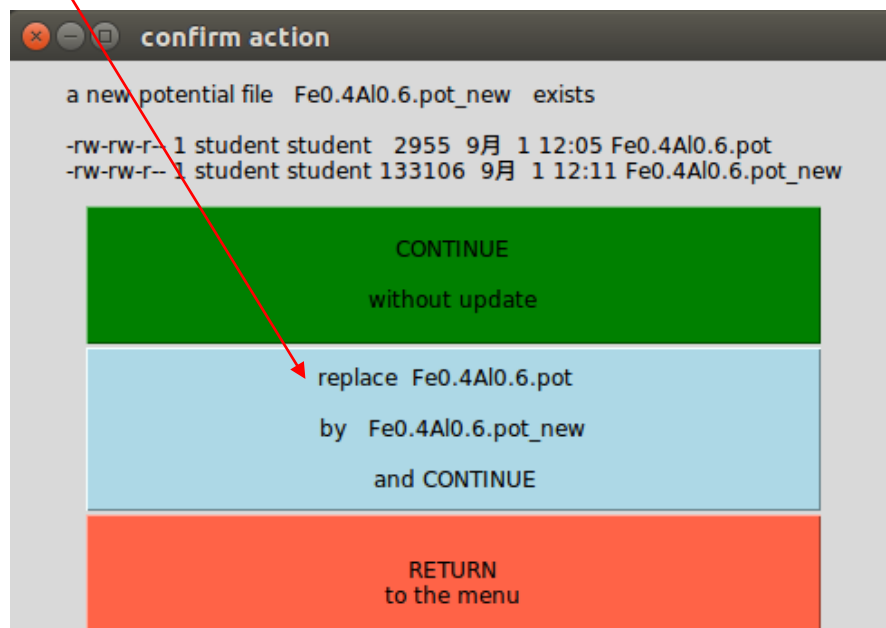
13. create input > DOS を選択



14. NEを増やす(DOSのエネルギー間隔の数)> write in file quit をクリック

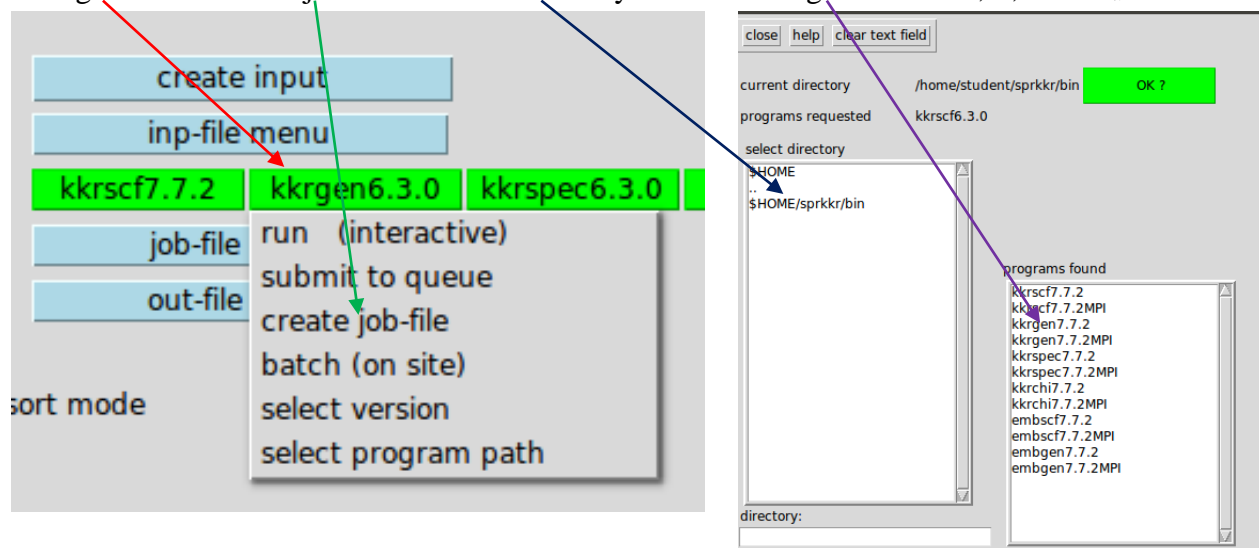


15. replace ... を選択 (pot_new はSCF計算後のポテンシャルファイル)

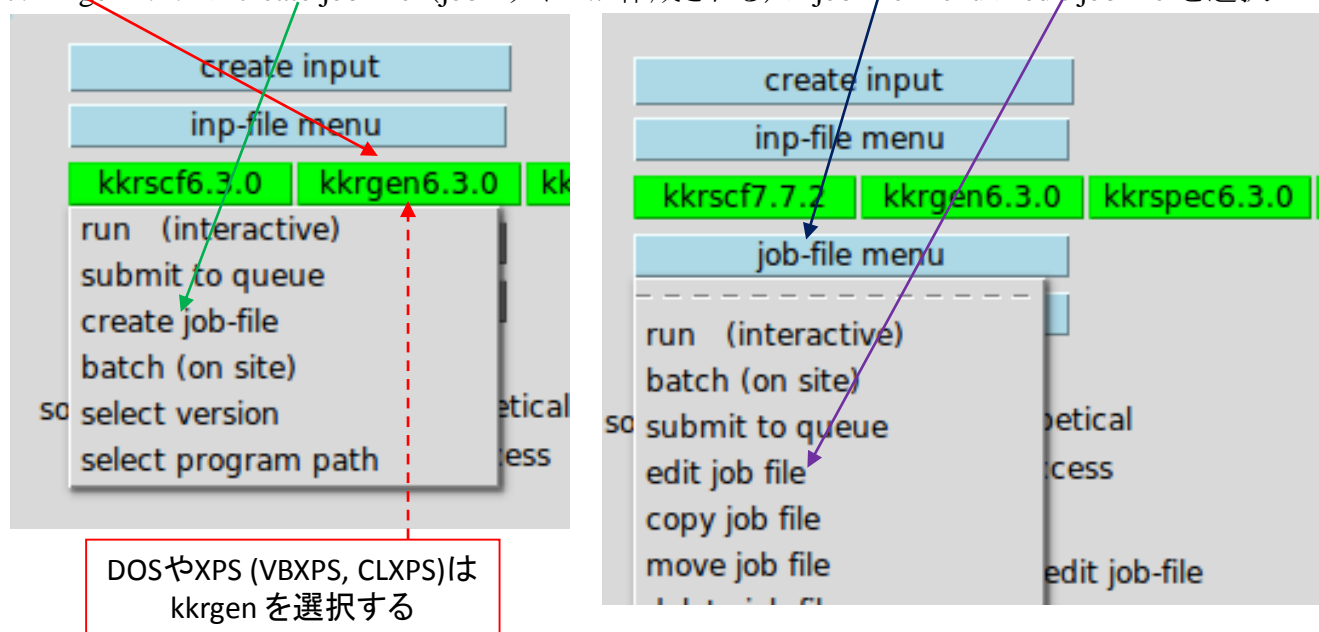


■ GUI(xband)の操作 -12- (DOS計算)

16. kkrngen6.3.0 > create job-file > select directory を変えて kkrngenX.Y.Z (X, Y, Zは数値)を選択

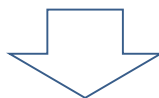


17. kkrngenX.Y.Z > create job-file (jobファイルが作成される) > job-file menu > edit job file を選択



18. source ... からの部分を書き換える (下の例では1 CPUの場合)

```
source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkr/calc/Fe04Al06
mpirun -np 8 /home/student/sprkkr/bin/kkrngen7.7.2MPI Fe0.4Al0.6_DOS.inp > Fe0.4Al0.6_DOS.out
```



並列計算の場合

```
#source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkr/calc/Fe04Al06
mpirun -np 4 /home/student/sprkkr/bin/kkrngen7.7.2 Fe0.4Al0.6_DOS.inp
```

並列数 (この例では4 CPUで計算)

1 CPUでの計算の場合

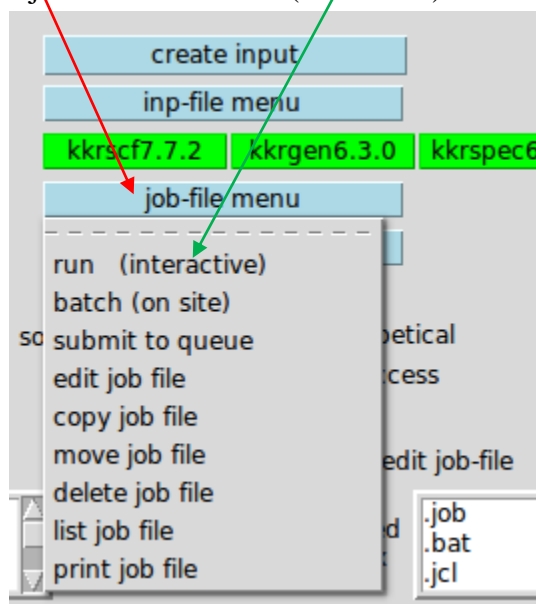
```
#source /usr/local/etc/bashrc_akhe
cd /home/student/sprkkr/calc/Fe04Al06
/home/student/sprkkr/bin/kkrngen7.7.2 < Fe0.4Al0.6_DOS.inp
```

入力ファイル名
自動的に記述される

今回の例では
Fe0.4Al0.6_SCF.inp

■ GUI(xband)の操作 -12- (DOS計算)

19. job-file menu > run (interactive) をクリック > 計算が走る > KKR-run finished successfully で終了



```
student@student-VirtualBox: ~/sprkkr/calc/Fe04Al06
300 E= 1.0000 0.0100 L= 2 IT= 2 Al CRYSTAL TERMS
DOS [1/Ry] | m_spin [m_B] | m_orb [m_B] | B_tot [kG]
INT(DE) 0.724 -0.015 0.001 0.1
SUM(MJ) 4.144 1.761 -0.017 0.049 -0.006 -0.002 -0.0 -0.0
MJ= -5/2 0.414 0.160 -0.414 -0.160 -0.827 -0.321 -2478.9 -0.0
MJ= -3/2 0.841 0.390 -0.020 -0.045 -1.251 -0.562 -3802.6 -0.0
MJ= -1/2 0.820 0.316 0.027 0.111 -0.423 -0.214 -1267.5 -0.0
MJ= 1/2 0.825 0.347 -0.031 -0.085 0.428 0.216 1267.5 0.0
MJ= 3/2 0.836 0.374 0.011 0.056 1.248 0.533 3802.6 0.0
MJ= 5/2 0.410 0.173 0.410 0.173 0.820 0.346 2478.9 0.0

300 E= 1.0000 0.0100 IT= 2 Al
DOS [1/Ry] | m_spin [m_B] | m_orb [m_B] | B_tot [kG]
INT(DE) crystal 3.654 -0.026 0.001 27.7
TOTAL crystal 4.910 0.095 -0.005 -99.3

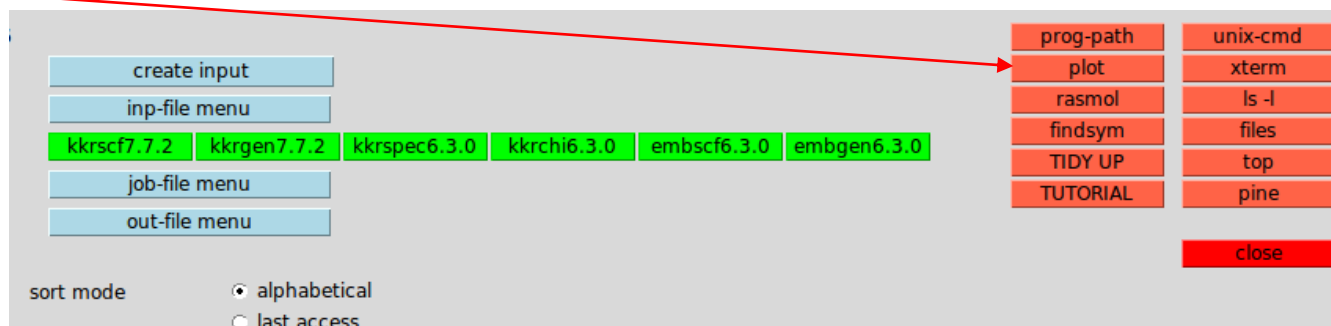
TOT 5.9309 6.4462 0.1637 0.00585

CPU - time used in <GEN>: 149,774 sec

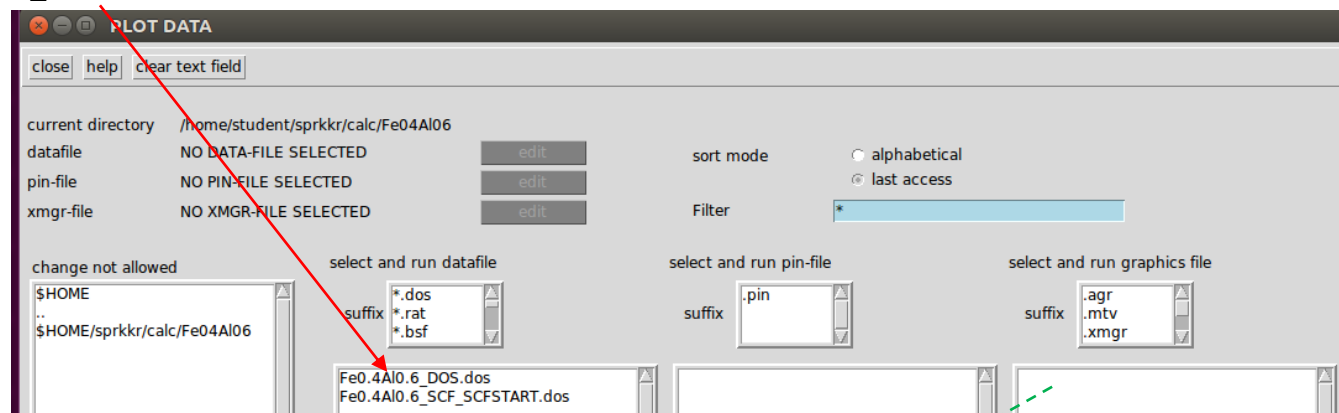
KKR-run finished successfully
Note: The following floating-point exceptions are signalling: IEEE_DENORMAL
student@student-VirtualBox:~/sprkkr/calc/Fe04Al06$
```

SCF計算や他の計算とほぼ同じ手順

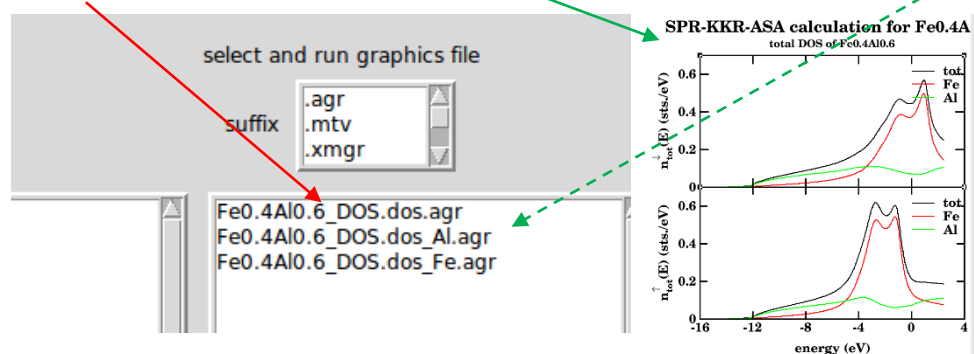
20. plot をクリック



21. _DOS.dos をクリック



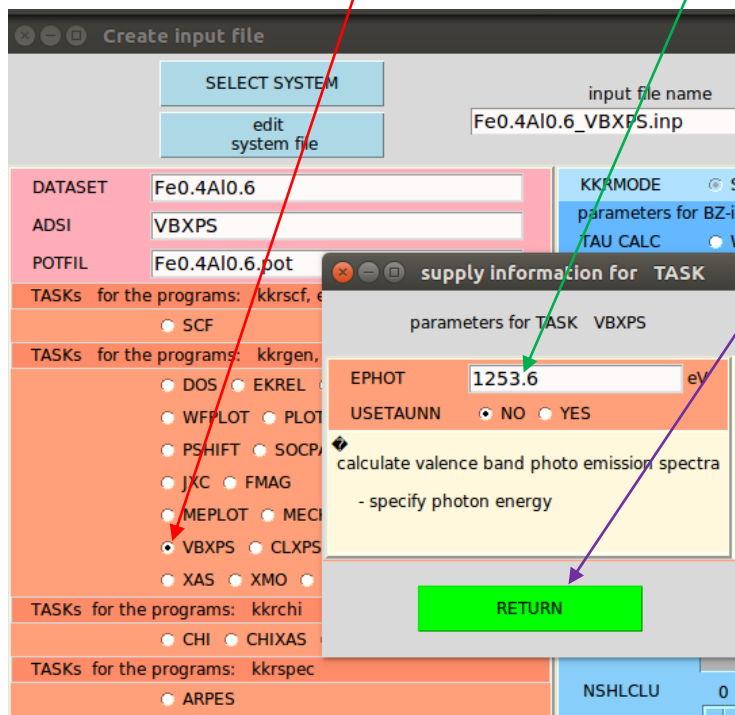
22. _DOS.dosのある行をクリック > 計算結果が表示される



DOSだけでなく
XPSなど他の計算でも
ほぼ同じ手順

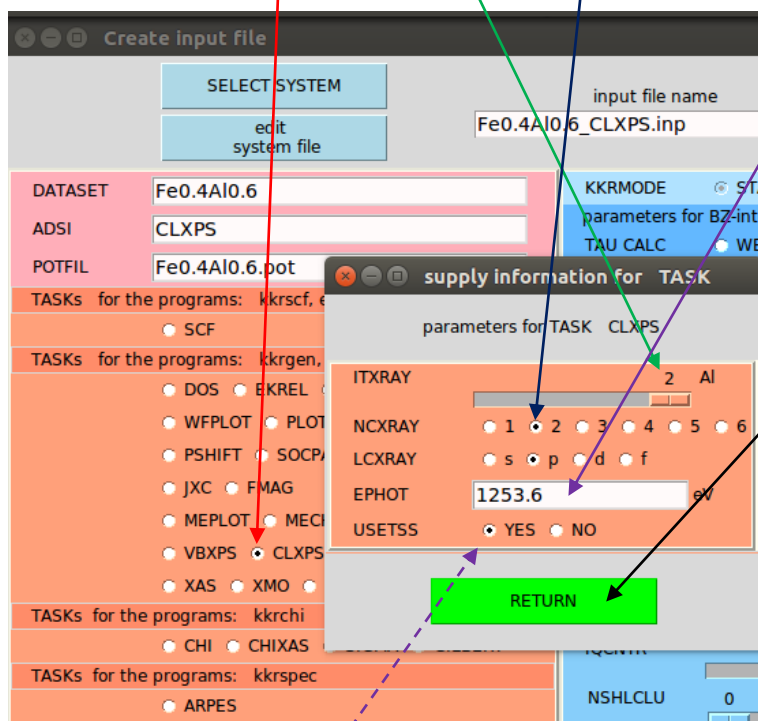
■ 付録: XPS (create input)

◇ 価電子帯 (VB) XPS: VBXPS を選択 > 光源のエネルギーを入力 > RETURN



例えば、実験室の光源なら
Mg $K\alpha_{1,2}$: 1253.6 eV
Al $K\alpha_{1,2}$: 1486.6 eV

◇ 内殻 (CL) XPS: CLXPS を選択 > 原子と軌道を選択 > 光源のエネルギーを入力 > RETURN



※ TSS: single site approximation for final states (遷移状態計算。終状態を考慮した計算)

※ 計算機の実環境によっては、CLXPSの計算が途中で止まって計算できないことがある。

※ Intel Fortranでコンパイルしていない場合は計算できないことが多い

■ 付録: 出力ファイル (内殻準位とフェルミ準位)

◇ フルポテンシャル計算 (FULLPOT) ではフェルミ準位が表示される

```
student@student-VirtualBox: ~/sprkkr/calc/Fe04Al06

*****
<SCFCHKNVAL>
*****

fix core and semi-core states and lower boundary for valence band

bottom of energy contour for band states  EMIN = -0.200
lower limit for semi-core states          ESCBOT = -0.200
upper limit for core states                ECTOP = -3.058

table of detected bound states (ignoring exchange splitting)

elmt  IT   Z   n  l   j      E (Ry)    NSH  NSUM  state  changed
-----
Fe     1   26   1  s  1/2   -512.983623  2    2   core   -
Fe     1   26   2  s  1/2   -58.914294  2    4   core   -
Fe     1   26   2  p  1/2   -50.616044  6   10   core   -
Fe     1   26   2  p  3/2   -49.698681  2   12   core   -
Fe     1   26   3  s  1/2   -5.587564  6   18   core   -
Fe     1   26   3  p  1/2   -3.170846  2    2   core   -
Fe     1   26   3  p  3/2   -3.058104  6    4   core   -

Al     2   13   1  s  1/2   -109.887496  2    2   core   -
Al     2   13   2  s  1/2   -6.800581  2    4   core   -
Al     2   13   2  p  1/2   -3.989388  6   10   core   -
Al     2   13   2  p  3/2   -3.957069  6   10   core   -
```

各原子に対する
軌道のエネルギー
1 Ry = 13.6057 eV

```
*****
total energies
*****

Fermi energy 0.794135 Ry

contribution to total energy of atom type IT= 1 Fe

core s: -1154.971303 p: -318.601282 d: 0.000000 f: 0.000000
valence s: 0.225658 p: 0.421196 d: 4.297711
Coulomb 0: 1071.819263 1: 0.000000 2: 0.000000 3: 0.000000
4: -0.000358
ex.-cor. 0: -111.917553 1: 0.000000 2: -0.000000 3: 0.000000
4: 0.002886

sum of single particle energies: -1468.6280197794
total contribution of the atom: -2545.7245146642

contribution to total energy of atom type IT= 2 Al

core s: -233.376171 p: -23.807052 d: 0.000000 f: 0.000000
valence s: 0.257694 p: 0.701835 d: 0.265924
Coulomb 0: 221.434003 1: 0.000000 2: -0.000000 3: 0.000000
4: 0.000157
ex.-cor. 0: -37.366965 1: 0.000000 2: -0.000000 3: 0.000000
4: -0.002053

sum of single particle energies: -255.9577696254
total contribution of the atom: -485.5641855533

total energy -1309.6283171976 Ry

*****
shift of muffin-tin zero VMTZ -0.753651
*****

rms-error for type 1: V = 3.5278D-06 B = 4.8752D-06
rms-error for type 2: V = 2.5261D-06 B = 2.5733D-06
iter. 23 average: V = 3.5278D-06 B = 4.8752D-06

execution time for last iteration 14.684 sec

*****
no problems with CPA-cycle !
*****

23 ERR 0.353E-05 0.488E-05 EF 0.79414 0.00000 D 8.366 M 0.7320 0.0220
ETOT -1309.62831720 SCF - cycle converged !!!!!!!

Note: The following floating-point exceptions are signalling: IEEE_UNDERFLOW_FLAG IEEE_DENOR
MAL
student@student-VirtualBox:~/sprkkr/calc/Fe04Al06$
```

フェルミ準位

最下位にある
SCF-cycle converged から
直ぐ上にある結果を用いる
(最終結果であるため)