

- ▼ \subsection{磁性材料でのspin計算}
 - ▶ \paragraph{磁性}
 - ▼ \paragraph{強磁性, 反強磁性}
 - 図{\ref{fe}}(a)のようにスピンの平行にならんでいる物質が強磁性で, 遷移金属のFe, Ni, Coや希土類金属のGdもしくはErOのような酸化物などある. 一方, 反強磁性体は図{\ref{fe}}(b)にした通り, 各サイトで交互にスピンの反平行に並び, 合成された磁気モーメントが0となる. MnO_2 , MnO , FeO , CoO などがある. 異なるサイトでのspin-DOSを表示させると上向きスピンと下向きスピンの逆転したような図となる.
 - \begin{figure}[htbp]
 \begin{center}
 \includegraphics[scale=0.6,bb=0 0 600 300]{./otsubo/Figure/magne.jpg}
 \caption{(a)強磁性体, (b)反強磁性体のモデル. }
 \label{fe}
 \end{center}
 \end{figure}
 \newpage
- ▼ \paragraph{計算実例}
 - 磁性を考慮した計算のためには, INCARファイルにおいて, VOSKOWN=1, ISPIN=2, ICHARG=2とし, MAGMONで原子の磁気モーメントを設定する.
 - ▼ \paragraph{VOSKOWN}
 - VASPは普通, 交換相関汎関数の相関部分は, 一般的な補間公式を使う. VOSKOWNが1にセットされた場合, Vosko-Wilk-Nusairの公式で内挿する. これは, 通常, 磁気モーメントや磁性エネルギーの計算を向上させる. GGAと併用のこと.
 - \begin{quotation}
 \begin{verbatim}
 default VOSKOWN=0
 0 一般的な補間公式
 1 Vosko-Wilk-Nusairの公式で内挿
 \end{verbatim}
 \end{quotation}
 - ▼ \paragraph{ISPIN}
 - スピンを考慮するかどうかを指定するパラメータ.
 \begin{quotation}
 \begin{verbatim}
 default ISPIN=1
 1 スピンを考慮しない
 2 スピンを考慮する
 \end{verbatim}
 \end{quotation}
 - ▼ \paragraph{ICHARG}
 - 初期の電荷密度をどう構成するかを決定するパラメータ.
 \begin{quotation}
 \begin{verbatim}
 default
 if ISTART=0 ICHARG=2
 else ICHARG=0
 0 電子密度を初期の波動関数から導出
 1 CHGCAR fileから初期のポジションを読み取り, 線形的な組み合わせで新しいポジションへ変換し外挿法から推定し導出
 2 スーパーポジションを取り電荷密度を導出 (磁性を考慮する場合は設定)
 \end{verbatim}
 \end{quotation}
 - ▼ \paragraph{MAGMON}
 - 計算対象とするモデルに含まれる各原子の磁性モーメントを指定するパラメータ. ISPIN=1の場合は考慮しない.
 \begin{quotation}
 \begin{verbatim}
 default
 \end{verbatim}
 \end{quotation}