

## 2 特殊な計算例

### 2.1 磁性材料での spin 計算

磁性は状態密度の上向きスピン (spin-up) と下向きスピン (spin-down) とを別々に表示すれば状態が理解しやすい。図 1 は代表的な強磁性体である Fe の状態密度で、3d に特徴的な箱形の DOS がほぼ並行移動したような形状となり、破線で示した Fermi 準位より下側に、spinup が多く入っている様子が見てとれる。

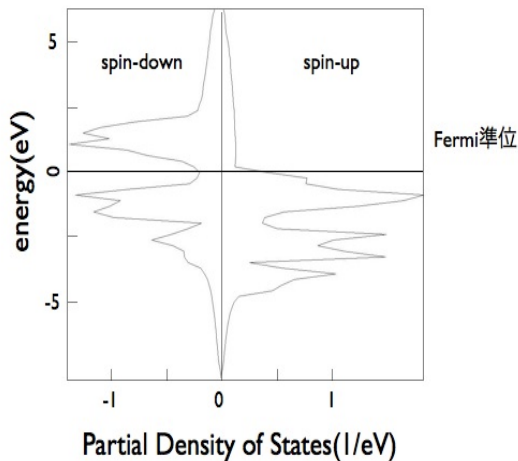


図 1: 強磁性体の状態密度図

**強磁性体** スピンが平行にならんでいる物質 (図 2(a)). 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が強磁性体である。ただし、強磁性体のこのような性質はある温度 (キュリー温度) 以上になると失われ、常磁性に転移する。

**反強磁性体** 反強磁性体はスピンの反平行に並び、合成された磁気モーメントが 0 であるもの (図 2(b)). 強磁性体同様、十分に温度を高くすると、普通の常磁性を示すようになる。MnF<sub>2</sub>, MnO<sub>2</sub>, FeO, CoO などがある。

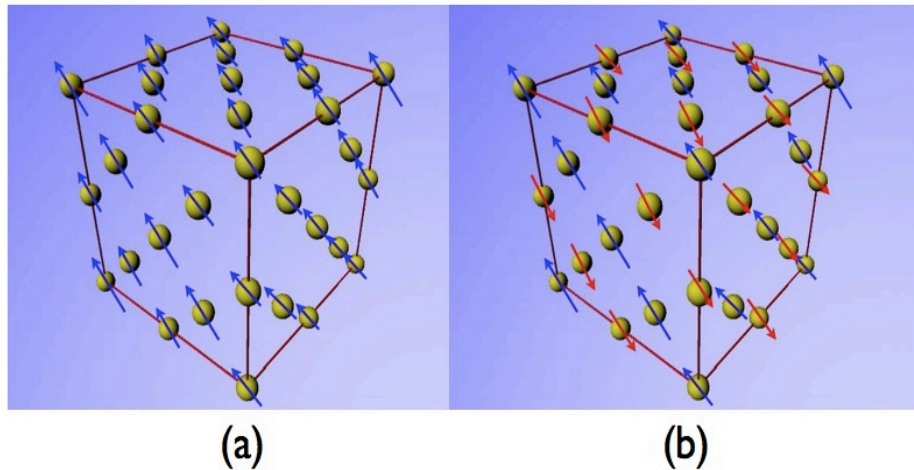


図 2: (a) 強磁性体のモデル (b) 反強磁性体のモデル

磁性体での計算の方法は、INCAR ファイルを書き換える。方法は INCAR ファイルの VOSKOWN=1 に、ISPIN=2, ICHAGE=2 にする。MAGMON で原子の磁気モーメントを設定すると、磁性材料での計算が実行できる

**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補間の方法を決定するパラメータである。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、磁性モーメントや磁性エネルギーの計算を向上させる。

default VOSKOWN=0

- 0 磁性を考慮しない。
- 1 磁性を考慮する。

**ISPIN** スピンを考慮するかどうかを指定するパラメータである。

default ISPIN=1

- 1 スピンを考慮しない。
- 2 スピンを考慮する。

**ICHAGE** 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である。

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 ファイルから電荷密度を読み取る。
- 2 スーパーポジションを取り電化密度を導出 (磁性を考慮する場合は設定)

**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である。ISPIN=1 の場合は考慮しない。

default

if non-collinear magnetic systems MAGMOM=3\*NIONS\*1.0

else MAGMOM=NIONS\*1.0

NIONS は POSCAR ファイルに表示されているの原子の数である。

PREC = Accurate	PREC = Accurate
ENCUT = 1000	ENCUT = 1000
IBRION = 2	IBRION = 2
NSW = 100	NSW = 100
ISIF = 3	ISIF = 3
NELMIN = 2	NELMIN = 2
EDIFF = 1.0e-05	EDIFF = 1.0e-05
EDIFFG = -0.02	EDIFFG = -0.02
VOSKOWN = 1	VOSKOWN = 1
NBLOCK = 1	NBLOCK = 1
NELM = 60	NELM = 60
ALGO = Normal (blocked Davidson)	ALGO = Normal (blocked Davidson)
ISPIN = 2	ISPIN = 2
MAGMOM = 6	MAGMOM = 5 4*-5 3*5 -5 4*5 4*-5 4*5 3*-5 5 4*-5 3*5
INIWAV = 1	INIWAV = 1
ISTART = 0	ISTART = 0
ICHARG = 2	ICHARG = 2
LWAVE = .FALSE.	LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .TRUE.	LCHARG = .TRUE.
ADDGRID = .FALSE.	ADDGRID = .FALSE.
ISMear = 1	ISMear = 1
SIGMA = 0.2	SIGMA = 0.2
LREAL = .FALSE.	LREAL = .FALSE.
RWIGS = 1.17	RWIGS = 1.17

図 3: (a) 強磁性体と (b) 反強磁性体の INCAR ファイル

ここで注意してほしいことは、MAGMON のパラメータ記法は、POSCAR ファイルにある原子の磁気モーメントを順番に記述している。

例えば、図 3 のように MAGMOM=5 4\*-5 と書かれている場合、図 4 のような POSCAR ファイルに記述している原子座標の磁気モーメントは一番上が 5、次から 4 つがそれぞれ -5 を意味する。

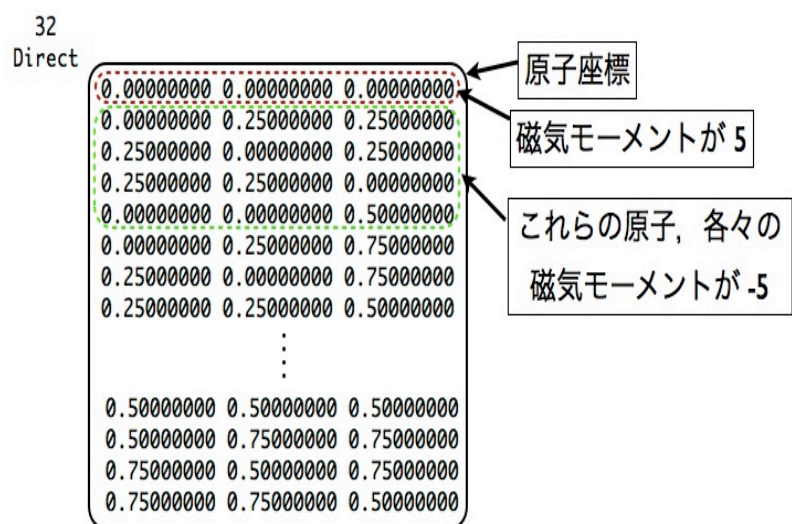


図 4: POSCAR ファイル中の原子座標