

- ▼ \section{特殊な計算例}
- ▼ \subsection{磁性材料でのspin計算}
 - ▼ %\paragraph{磁性}
 - 磁性を原子系から理解するにはSpin-up,Spin-downの状態密度図をみるのが良い方法である. \\ 図{\ref{dos}}は代表的な強磁性体であるFeの状態密度図である. 図{\ref{dos}}をみればSpin-upのDOSはフェルミエネルギーより小さいところでは, Spin-downに比べて非常に状態密度が高い. これにより, Feの原子はSpin-upだけになり, スピンが平行に並び強磁性体となる.
 - %磁化Mは単位体積あたりの磁気モーメントで定義する. 単位体積あたりの磁化率は

$$\chi = \frac{(\mu_0 M)}{B}$$
%で定義される. Bは巨視的な磁場の強さである. \\ % 負の磁化率を持つ物質は反磁性体と呼ばれ,正の磁化率を持つ物質は常磁性体と呼ぶ. %常磁性体には, 温度による磁氣的性質の変化があまりないものと, ある温度を境に急激に性質が変化するものがある. 後者は磁気相転移温度以下で磁気秩序構造をつくる.
 - ▼ \begin{figure}[htbp]
 - \begin{center}
\includegraphics[scale=0.3,bb=0 0 700 600]{./Figure/dos.jpg}
\caption{強磁性体の状態密度図}\label{dos}
\end{center}
\end{figure}
 - ▼ \paragraph{強磁性体}
 - スピンの平行にならんでいる物質(図{\ref{fe}}(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.
 - ▼ \paragraph{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{\ref{fe}}(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. \\ MnF₂, MnO₂, FeO, CoOなどがある.
 - \begin{figure}[htbp]
\begin{center}
\includegraphics[scale=0.6,bb=0 0 600 300]{./Figure/magne.jpg}
\caption{(a)強磁性体のモデル(b)反強磁性体のモデル}
\label{fe}
\end{center}
\end{figure}
\newpage
 - 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\\
 - ▶ \paragraph{VOSKOWN}
 - ▼ \paragraph{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.
 - ▼ \paragraph{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. \\