

(不親切です。) [Qiitaでの解説](#)も参考にしてください。

基礎知識check

- LDA計算の流れ
- MT division of space
- 基底関数 MTOとAPW (AugmentationとMT内の原子的な波動関数). 3つの成分をもつ。envelope + true - counter
- バンド計算法PMT=LMTO+LAPW法. 3つの成分で電荷も表現する。MTOの張る空間の不満足な部分を3Ry以下程度のAPWでサポートする。
- 独立粒子近似とは
- Hartree-Fock(HF)近似で水素Hがきちんと解ける。一様ガスではフェルミ面で状態密度がゼロになる。
- LDAでは一様ガスがきちんと解けるがHのバンドギャップはかなり小さい。
- LDAとHFは両極にある。HFではSiのバンドギャップは10eV以上 (なぜか?) ハイブリッド法 HSE。自己相互作用。
- 交換項の重要性。H2のbonding-antibondingを区別するには、占有状態へのプロジェクタの役割をするFock項が重要
- GW近似. Fock項にくわえて相関項。分極媒質中を走る荷電粒子の感じる時間依存ポテンシャル。スクリーンHF+クーロンホール
バンドギャップ、dバンドの位置、Uの効果
- QSGW法。GW近似における自己エネルギーからいくらか強引に時間依存性をとりのぞいて特殊な交換相関項をつくる。
- (できたら線形応答理論の基礎、ステップ関数のフーリエ変換、古典的な減衰振動系でのグリーン関数(線形応答関数)。)

ecalj 何ができるか？

PROF

- LDA計算
VWN,PBE-GGA,LDA+Uがえらべる。
構造緩和(格子変化は手動)、Colinear, SOC(軸を選べる), AFの対称性を入れることができる。
ESM法でのスラブ計算. 最適化しきれてないので現状では構造緩和などでは優位性がない。
- QSGW計算:
self-consistent GW法。特殊な交換相関項を作る計算であるといえる。
自己エネルギースペクトルプロット。
インパクトイオン化率(オージェによる寿命)。
GPU化、自動化セッティング。
GW法でのバンドプロットが直接に可能。
QSGWでは現状全エネルギー計算ができない。バンド構造(固有値、波動関数)のみ。
- 線形応答などの計算。
RPAでの誘電率計算、スピンゆらぎ計算(改良の余地。金属でもできる。ドルーデウエイト

($q \rightarrow 0$)

MaxlocWannier(内蔵している)、MLO(新しいモデル化法: まだ余地あり)。自動化がすこしできてないところがある。

その他の物理量についても応用できるはず。

- かなりの部分で自動計算が可能。QSGW法ではMaterial Projectから1500個程度の構造ファイルを持ってきて自動化でQSGW計算しているが
ほぼ問題なく可能。個別にセッティングを手動でいじらなくても良い(4f,5fについては自動化がまだ設定できてないが基本的に可能)
バンドプロットも対称ラインも含め自動化してある。データはgnuplotなどでプロットするので読みやすい。結晶構造についてはPOSCARとの相互コンバータあり。
複数のPOSCARを一括計算するecalj_autoも梱包してある(整備中)。

実際の計算のながれ

1. POSCARからctrlsファイル生成。

ctrls.fooobarはecaljの構造ファイル。vasp2ctrlで生成する。サンプルがあるのでたとえば以下の手順でPOSCARを準備

```
cd ecalj
mkdir TEST
cd TEST
mkdir test1
mkdir test2
cat ecalj_auto/INPUT/testSGA/joblist.bk
cp ../ecalj_auto/INPUT/testSGA/POSCARALL/POSCAR.mp-2534 test1
cp ../ecalj_auto/INPUT/testSGA/POSCARALL/POSCAR.mp-8062 test2
```

これらのPOSCARをvasp2ctrlで変換する。cifのときは一度POSCARに直してからvasp2ctrlを行う。

```
vasp2ctrl POSCAR.mp-2534
mv ctrls.POSCAR.mp-2534.vasp2ctrl ctrls.POSCAR.mp-2534
cat ctrls.mp-2534
```

ctrls.mp-2534 contains crystal structure equivalent to POSCAR:

```
cat ctrls.mp-2534
STRUC
      ALAT=1.8897268777743552
      PLAT=      3.52125300000      0.00000000000      2.03299700000
              1.17375100000      3.31986900000      2.03299700000
              0.00000000000      0.00000000000      4.06599300000
      NBAS=2
      SITE
      ATOM=Ga POS=      0.00000000000      0.00000000000
```

```
0.000000000000
      ATOM=As POS=      1.17375100000      0.82996725000
2.03299675000
```

- MEMO:
 - ctrl2vasp ctrl.mp-2534 can convert back to VASP file. Check this by VESTA. We can use viewvesta (convert and invoke VESTA).
 - many unused files are generated (forget them).

2. ctrlからctrl

ctrlはecaljの基本入力ファイル。ctrlgenM1.pyで生成する。

生成されたctrlに説明が埋め込まれている。k点、pwemax, nspin, soなどが注目点。

lmf起動時に-vnspin=2などでconst foobar=1 などと書かれている変数{foobar}がoverrideできる。

対称性、AF対称性を課した計算が可能(QSGWでも)。ctrlgenM1.pyの内部ではlmfa,lmchk(原子球サイズ決定) などと呼んでいる。

これ以後の計算にはctrl.foobarのみ残しておけば良い（ムダファイルが大量にできているのは消して良い）。

```
ctrlgenM1.py mp-2534
cp ctrlgenM1.ctrl.mp-2534 ctrl.mp-2534
```

- ctrlでセットされるいくつかの変数
 - nk1,nk2,nk3
 - xcfun
 - ssig
 - pwemax
 - gmax
 - so
 - socaxis
- ctrlに書き込める[インプットの表](#).

3. LDA計算

lmfa,lmfの順で行う。lmfaは瞬時に終わる。初期条件のための球対称原子の計算。lmfaの出力をgrep confすると、原子の電子配置が見て取れる。lmfaは繰り返しても副作用なし。PlatQlat.chk, SiteInfo, estatpot.dat,ECOREなどのファイルができる。grep gap llmfでバンドギャップ確認。

```
lmfa ctrl.mp-2534
```

gives spherical atom calculation for initialization. No side effects to repeat.

```
lmfa ctrl.mp-2534 |grep conf
show atomic configuration (not necessary).
```

Files:

```
save.* : computational history. DFT total energy is shown at each iteration (See lmf next).
atmpnu* : radial derivative file. Used at lmf
atm.* : atom potential Used at lmf (only init)
ves* : obsolete
log* : just for debug log
```

Main part calculation:

```
mpirun -np 8 lmf mp-2534 |tee llmf
```

- mp-2534 gives 5.75 Å for GaAs, while the experimental value is 5.65 Å
- llmf contains iteration log, band eigenvalue, and so on. Check band gap.
- rst.mp-2534 is generated. Self-consistent charge included.
- You can change lattice constant as $ALAT=1.889726877743552*5.65/5.75$ in ctrl file. simple math can be possible in ctrl
- Note: ctrlp is intermediate file generated by python from ctrl. Fortran calls a python code internally.
- check save.mp-2534. Show history of lmfa and lmf. one line per iteration. Show your console options. c,x,i,h
LDA energy shown two values need to be the same (but slight difference).
Repeat lmf stops with two iteration.
- SiteInfo.lmchk
- PlatQlat.chk
- estaticpot.dat

PROF

4. job_pdos, job_tdos, job_fermisurface, job_bandなどでバンドプロットなどをおこなう

job_band実行前にバンドプロットの対称ライン [syml.foobar](#) が必要。これは getsyml foobar として取得できる。

```
getsyml mp-2534
```

これで syml.mp-2534 ができる。 [BZ.html](#) には BZ 図とシンメトリラインが描かれる。
bandplotを行うには

```
job_band mp-2534 -np 8 [options]
```

とする。job_bandの最後にoptionとして vso=1 -vnspin=2とすればSOCを摂動として加えたバンドがプロットできる。

結果はgnuplotファイルに書かれる bandplot.isp1.glt。

5. QSGW計算

QSGW計算を行うには、mkGWinput foobarでGWinputを作っておくこと。

```
mkGWinput ctrl.mp-2534
```

生成されたGWinput.tmpをあ編集してGWinputとする。

n1n2n3のk点数は小さめに取らざるをえない。Siで6x6x6が目安。

それ以外はあまりいじらない。gwscで実行できる。半導体で数回回すと良い。QPUファイルにGW計算の対角項の成分が書かれる。Mixed Produce basisのコンセプトがこのGW計算のキーになる。

QSGW計算の流れ

```
gwsc -np NP [--phispinsym] [--gpu] [--mp] nloop extension
```

(--phispinsym is for magnetic materials to keep the same basis for up and down)

を実行すると、

```
### START gwsc: ITERADD= 1, MPI size= 4, 4 TARGET= si
===== Ititial band structure =====
---> No sigm. LDA caculation for eigenfunctions
0:00:00.226245 mpirun -np 1 /home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/lmfa
si >llmfa
0:00:00.807062 mpirun -np 4 /home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/lmf
si >llmf_lda
===== QSGW iteration start iter 1 ===
0:00:03.071054 mpirun -np 1 /home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/lmf
si --jobgw=0 >llmfgw00
0:00:03.904403 mpirun -np 1
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/qg4gw --job=1 > lqg4gw
0:00:04.431022 mpirun -np 4 /home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/lmf
si --jobgw=1 >llmfgw01
0:00:05.918216 mpirun -np 1
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/heftet --job=1 > leftet
0:00:06.444439 mpirun -np 1
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hbasfp0 --job=3 >lbasC
0:00:07.064558 mpirun -np 4
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hvccfp0 --job=3 > lvccC
0:00:07.812283 mpirun -np 4
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hsfp0_sc --job=3 >lsxC
0:00:08.545956 mpirun -np 1
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hbasfp0 --job=0 > lbas
```

```

0:00:09.156775 mpirun -np 4
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hvccfp0 --job=0 > lvcc
0:00:09.884064 mpirun -np 4
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hsfp0_sc --job=1 >lsx
0:00:10.644292 mpirun -np 4
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hrcxq > lrcxq
0:00:11.482931 mpirun -np 4
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hsfp0_sc --job=2 > lsc
0:00:12.460776 mpirun -np 1
/home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/hqpe_sc > lqpe
0:00:13.019735 mpirun -np 4 /home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/bin/lmf
si >llmf
===== QSGW iteration end iter 1 ===
OK! ===== All calculation finished for gwsc =====
Comparison OK! max(abs(QPU-QPU))= 0.0050000000000002558 <etol= 0.011
for QPU
Comparison OK! MaxDiff= 0.00019999999999997797 < tol= 0.003 for
log.si
=== EndOf si_gwsc at /home/takao/ecalj/SRC/TestInstall/work/si_gwsc

```

という感じで進行する。Cが末尾につくのはコア。lsxCでコアからの交換項への寄与が計算できる。lsxは交換項の計算、lscが相関項の計算。lvccはクーロン行列の計算。この計算ではgwsc-np 8 1 siとしてまわしている。1はQSGWイテレーションの回数。

gwscを追加で行うと、イテレーションの回数が追加される。

計算やり直しするには？

Start over

Remove mix* rst* (mix* is mixing files)

If MT changes, start over from lmfa (remove atm* files)

- As long as converged, no problem.
- If you have 3d spaghetti bands at E_f , need caution.

—
PROF

6. 誘電関数、ESM法、スピンゆらぎ、準粒子寿命 (QSGW)、ワニエ法など (要相談)

7.lmchk

lmchk mp-2534

で結晶対称性、MT半径、重なり具合などがチェックできる。通常-3%の重なり具合になるようにしている。

- symmetry
- MT overlap

たとえば磁性が結晶の格子の対称性より低い場合、これの表示する対称性をみて、空間群の生成子をSYMGRPのあとに加えてやる必要がある。そうするとfindでおこなったよりも低対称な計算ができる。SOCをいれて磁気モーメントを見たいときなども注意する必要あり。

memo

スピン軌道相互作用を入れたバンドプロット

method 1: only band plot

```
job_band mp-2534 -np 8 -vso=1 -vnspin=2: band plot only
```

Caution: when you set nspin=2, rst is twiced. No way to move it back to rst for nspin=1.

method 2. single iteration and SO=1

```
mpirun -np 8 lmf -vso=1 -vnspin=2 -vnit=1
```

job_band mp-2534 -np 8 : band plot only

method 3. full iteration SO=1

```
mpirun -np 8 lmf -vso=1 -vnspin=2 -vnit=1
```

job_band mp-2534 -np 8 : band plot only

Caution: when you set nspin=2, rst is twiced. No way to move it back to rst for nspin=1.

ecalj/Samples/MgO_PROCAR

ファットバンドのサンプル.job_procarを実行する。epsができる。