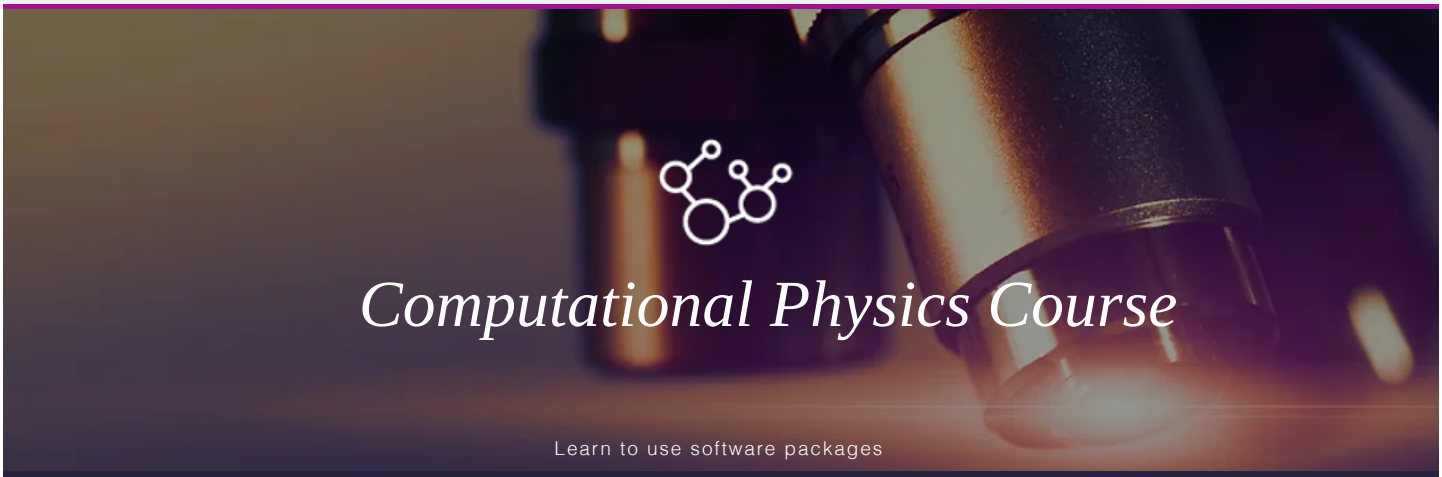

Maximally localized Wannier orbital

We have used the plane wave basis set to describe the Kohn-Sham orbital. This allows us to very flexibly describe the orbitals, but it is not convenient to understand them in terms of the atomic orbitals; It is easier to use 2s, 2p, and sp2 orbitals. To do this, here we construct a localized orbital by applying a unitary transformation to the Kohn-Sham orbitals, which diagonalize the Kohn-Sham Hamiltonian.

By constructing the maximally localized Wannier orbital, we usually obtain atomic orbitals as expected, although this is not trivially easy. Wannier orbital, which is expected to be familiar to you, is constructed by superposing Kohn-Sham orbitals belonging to various wave numbers, or k-vectors. This is done using single band. By superposing Kohn-Sham orbitals belonging different bands in addition, we can localize the orbitals further.

Here we do scf and nscf calculations as a preparation.

```
&control
calculation = 'scf'
prefix='graphene',
tstress = .true.
tprnfor = .true.
pseudo_dir = './',
outdir='./work/'
disk_io='low'
wf_collect=.true.
/
&system
ibrav = 4,
celldm(1) = 4.602,
celldm(3) = 4,
nat = 2,
ntyp = 1,
ecutwfc = 30.0,
ecutrho = 150.0,
occupations = 'smearing'
smearing = 'm-p'
degauss = 0.01
/
&electrons
mixing_beta = 0.7
conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
C 12.0107 C.pz-van_ak.UPF
ATOMIC_POSITIONS {alat}
C 0.00 0.00 0.00
C 0.00 0.57735026918962576451 0.00
K_POINTS {automatic}
12 12 1 0 0 0
```

```
&control
 calculation = 'nscf'
 prefix='graphene',
 tstress = .true.
 tprnfor = .true.
 pseudo_dir = './',
 outdir='./work/'
 disk_io='low'
 wf_collect=.true.
/
&system
 ibrav = 4,
 celldm(1) = 4.602,
 celldm(3) = 4,
 nat = 2,
 ntyp = 1,
 ecutwfc = 30.0,
 ecutrho = 150.0,
 occupations = 'smearing'
 smearing = 'm-p'
 degauss = 0.01
 nbnd = 16
/
&electrons
 mixing_beta = 0.7
 conv_thr = 1.0d-8
/
ATOMIC_SPECIES
C  12.0107  C.pz-van_ak.UPF
ATOMIC_POSITIONS {alat}
C 0.00 0.00 0.00
C 0.00 0.57735026918962576451 0.00
K_POINTS {crystal}
144
     0.00000000     0.00000000     0.00000000     0.00694444
     0.00000000     0.08333333     0.00000000     0.00694444
     0.00000000     0.16666667     0.00000000     0.00694444
```

0.00000000	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.08333333	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.16666667	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.25000000	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.33333333	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.41666667	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.50000000	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.58333333	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.08333333	0.00000000	0.00694444

0.66666667	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.75000000	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.83333333	0.91666667	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.00000000	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.08333333	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.41666667	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.50000000	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.58333333	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.66666667	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.75000000	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.83333333	0.00000000	0.00694444
0.91666667	0.91666667	0.00000000	0.00694444

次へ

Having learned DFT, let us move to learning program packages. We begin by learning Quantum Espresso

The University of Tokyo