

このホームページは **WIX.com** を使って作成されました。あなたも無料で作ってみませんか？

[今すぐはじめる](#)



Computational Physics Course

Learn to use software packages

Home

More

Maximally localized Wannier orbitals (2)

```
num_bands      = 16
num_wann       = 5
```

```
dis_win_min = -30
dis_win_max = 12
dis_froz_min = -30
dis_froz_max = 2.6
```

```
begin projections
C: pz
f= 0.167, 0.333, 0.00: s
f=-0.333,-0.167, 0.00: s
f= 0.167,-0.167, 0.00: s
end projections
```

```
write_hr = .true.
bands_plot = .true.
wannier_plot = .true.
```

```
wannier_plot_supercell = 3
```

```
!exclude_bands=
```

```
begin kpoint_path
```

G	0.00000	0.00000	0.00000	K	0.33333	0.33333	0.00000
K	0.33333	0.33333	0.00000	M	0.50000	0.00000	0.00000
M	0.50000	0.00000	0.00000	G	0.00000	0.00000	0.00000

```
end kpoint_path
```

```
begin unit_cell_cart
```

```
bohr
4.602      0.0000000000      0.0000000000
-2.301     3.98544890821598665238      0.0000000000
0.0000000000      0.0000000000      18.408
end unit_cell_cart
```

```
begin atoms_frac
```

```
C 0.00000000 0.00000000 0.00
C 0.33333333 0.66666667 0.00
end atoms_frac
```

```
mp_grid      = 12 12 1
```

```
begin kpoints
```

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	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.33333333	0.00000000	0.00694444
0.00000000	0.41666667	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

Save the left as 'graphene.win' and type

`$wannier90.x -pp graphene`

By this, we prepare nnkp files (graphene.nnkp) to be used by wannier90.x and graphene.win.

Number of bands and Wannier orbitals:

It should be reminded that num_bands should be equal to the number of bands used in the scf calculation.

- num_bands = 16
- num_wann = 5

Outer window, Inner window:

- dis_win_min = -30
- dis_win_max = 12
- dis_froz_min = -30
- dis_froz_max = 2.6

Inner window (dis_froz_min and dis_froz_max) indicates a range in the energy within which the original bands are reproduced accurately.

Outer window (dis_win_min, dis_win_max) is a range in the energy wherein the original bands to be reproduced are contained. Here we set inner

このホームページは **WIX.com** を使って作成されました。あなたも無料で作ってみませんか？

[今すぐはじめる](#)

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	0.16666667	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.25000000	0.00000000	0.00694444
0.66666667	0.33333333	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

This setting of the window is technical in the sense that we need to exclude those bands above 2.6 eV because they have a different orbital character difficult to localize. Outer window, on the other hand, includes all the bands below 12 eV.

projection

- begin projections
- C: pz
- f= 0.167, 0.333, 0.00: s
- f=-0.333,-0.167, 0.00: s
- f= 0.167,-0.167, 0.00: s
- end projections

The bands are to be projected to pz orbital of carbon, which is represented initially by s-type orbitals located at the three positions indicated here.

specification of outputs

- hr_plot = .true.
- bands_plot = .true.
- wannier_plot = .true.

By this, plotted are the Wannier Hamiltonian, Wannier bands, and Wannier wave function. To plot the Wannier wave function, we need to set write_unk = .true. in doing the wannier90.x calculation.

Miscellaneous

The input also requires parameters used for the SCF calculation.

このホームページは **WIX.com** を使って作成されました。あなたも無料で作ってみませんか？

今すぐはじめる

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

end kpoints

次へ



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

The University of Tokyo

© 2016 by Osamu Sugino