M winmostar チュートリアル

AkaiKKR基礎編

V11.1.0

2022年4月19日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



• まず、純ニッケルの状態密度、バンド構造をAkaiKKRによる第一原理計算から取得します。次に、ニッケルに鉄を10%混ぜた固溶体についても同様の計算を行います。



- 注意点:
- プロフェッショナル版エコノミーまたは学生版ではAkaiKKR GUIは利用できません。



AkaiKKRインストールマニュアル

<u>https://winmostar.com/jp/manual_jp/installation/AkaiKKR_install_manual_jp_win.pdf</u>に 従い、AkaiKKRをインストールしてください。

I. 系のモデリング(純ニッケル)

プロジェクトモードはAkaiKKRに対応していないため必ずファイルモードを使用してください。 ファイル | 新規ファイルをクリックし、ファイル | インポート | Samplesファイル | ni.cifをク リックします。破棄して読み込みをクリックすると、ニッケルが出現します。

任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル「ファイルをインポートを使います。



C:¥winmos1101test1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥propylene.wmpj - Winmostar (PREMIUM) V11.1.0



ファイルをインポート х 現在の内容を破棄して新しい分子構造を読み込みますか? キャンセル

WINMOSTAR Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

- 1. ツールバーのソルバからAkaiKKRを選択します。
- 2. 🕑 (キーワード設定) をクリックします
- 3. AkaiKKR Keyword Setupウィンドウ左下のResetをクリックし、はいをクリックします。



- 1. Basicタブでmagtypをmagに変更します。
- **2.** Postprocessタブをクリックし、Calc density of statesとCalc band structureにチェッ クを入れます。



- 1. AkaiKKR Keywords Setupウィンドウ右下のRunをクリックします。
- 2. 保存ダイアログが開いたら**ファイル名**に「ni100」と入力し**保存**をクリックします。その後黒 いコンソールウィンドウが自動で立ち上がり計算が実行されます。計算は数十秒で終了しコン ソールウィンドウは自動で閉じられます。

🚳 AkaiKKR Keywords Setup	– 🗆 ×	
Potential file Create V	# threads 1 (scheduled)	
Basic Advanced Lattice Atom Postprocess		新規ジョブを開始する前に入力ファイルを保存してください
Calc density of states		← → ✓ ↑ - ≪ release → UserData ✓ ひ /> UserDataの検索
edelt 0.001 ewidth	1.0 bzqlty 12 ~	ファイル名(<u>N</u>): <u>ni100</u> ~ ファイルの使行(T): <u>AlsiKKP Input Eilo(* aki)</u>
Calc band structure		 ✓ フォルダーの参照(B) (B) (保存(S)) ((h)) ((h)) ((h)) ((h)) ((h))
edelt 0.001 ewidth	1.0	NJ
k-path 300 ☑ Use default	0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000 0.500000 1.000000 0.000000 0.750000 0.750000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.500000 0.500000 0.500000	
Reset Import Export	OK Cancel Run	

1. **ログを表示**ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと計算のログ ファイルが表示されます。

🥮 ni100.ako - 义モ帳	_		×
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)			
15-Apr-2022 1:03:19 operating system not known: number of cores= 4 is assumed. meshr mse ng mxl			^
400 35 15 3 data read in go=go file=ni100.akd brvtyp=fcc a= 6.62500 c/a= 0.00000 b/a= 0.00000 alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0 edelt= 1.0E-03 ewidth= 1.000 reltyp=nrl sdftyp=mjw magtyp=mag record=2nd outtyp=update bzglty=4 maxitr=100 pmix= 0.02300 mixtyp=tcbb=brydb			
complex energy mesh			
1(-1.0000, 0.0000) 2(-0.9998, 0.0027) 3(-0.9990, 0.0062) 4(-0.9971, 0.0107) 5(-0.9933, 0.0163) 6(-0.9862, 0.0234) 7(-0.9738, 0.0319) 8(-0.9535, 0.0421) 9(-0.9220, 0.0536) 10(-0.8757, 0.0660) 11(-0.8117, 0.0782) 12(-0.7292, 0.0889) 13(-0.6307, 0.0965) 14(-0.5224, 0.0999) 15(-0.4130, 0.0985) 16(-0.3115, 0.0926) 17(-0.2245, 0.0835) 18(-0.1553, 0.0724) 19(-0.1037, 0.0610) 20(-0.0671, 0.0500) 21(-0.0424, 0.0403) 22(-0.0262, 0.0320) 23(-0.0160, 0.0251) 24(-0.0096, 0.0195) 25(-0.0057, 0.0151) 26(-0.0034, 0.0116) 27(-0.0020, 0.0089) 28(-0.0012, 0.0069) 29(-0.0007, 0.0052) 30(-0.0004, 0.0040)			~
1 行、1 列 100% Unix (LF)	UTF-	8	

III.結果解析 SCFエネルギー変化(純ニッケル)

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

1. エネルギー変化ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くとSCF計算 におけるエネルギーの変化のグラフを確認することができます。



III.結果解析 状態密度(純ニッケル)

1. **E 結果解析 | 状態密度**をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと、状態密度 が表示されます。



III.結果解析 バンド構造(純ニッケル)

1. ■ 結果解析 | バンド構造をクリックし、ni100.akd_dn.spc(Downスピン)を開くと、数 秒コンソールウィンドウで処理が実行された後、PDFファイルにてバンド構造が表示されま す。Upスピンの場合はNi100.akd_up.spcを選択します。





IV.系のモデリング(ニッケル-鉄固溶体)

次に、ニッケル 90%-鉄10 %の固溶体を作成します。ここでは純ニッケルの占有率を変更する手順を示しますが、Occupancyが設定されたCIFファイル(Samples¥ni90fe10.cif)を読み込んで も同様の計算が可能です。

- 1. 編集 | 原子の属性を変更 | 占有率を変更をクリックします。
- 2. Addをクリックします。
- 3. 2行目のElementに「Fe」と入力します。

IV.系のモデリング(ニッケル-鉄固溶体)

- 1. 1行目のOccupancyに「0.9」、2行目のOccupancyに「0.1」を入力します。
- 2. OKをクリックします。

V. 計算の実行(ニッケル-鉄固溶体)

- 1. **〇 (キーワード設定)** をクリックします
- 2. Runをクリックしファイル名に「ni90fe10」と入力し保存をクリックすると計算が開始されます。

🚾 AkaiKKR Keywords Setup	– 🗆 X	
Potential file Create ~	# threads 1 (scheduled)	
Calc density of states		
edelt 0.001 ewidth 1	1.0 bzqlty 12 V	● 新規ジョンを開始する前に入力ファイルを保存してくたさい く → ◇ ↑ □ ≪ release > UserData > ◇ ひ ○ ○ UserDataの検索
edelt 0.001 ewidth 1	1.0	ファイル名(N): ni90fe10 、 ファイルの種類(<u>T</u>): AkaiKKR Input File(*.aki)
k-path 300 Use default	0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000 0.500000 1.000000 0.000000 0.750000 0.750000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.500000 0.500000 0.500000	✓ フォルダーの参照(B) (保存(S)) ((R)) ((R))
Reset Import Export	OK Cancel Run	

VI.結果解析 状態密度(ニッケル-鉄固溶体)

1. **E 結果解析 | 状態密度**をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと、状態密度 が表示されます。

VI.結果解析 バンド構造(ニッケル-鉄固溶体)

1. ■ 結果解析 | バンド構造をクリックし、ni90fe10.akd_dn.spc(Downスピン)を開くと、 数秒コンソールウィンドウで処理が実行された後、PDFファイルにてバンド構造が表示されま す。Upスピンの場合はni90fe10.akd_up.spcを選択します。

• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。

<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>の受講をご検討ください。(詳細はP.2)
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、<u>お問合せフォーム</u>に、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上