## **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

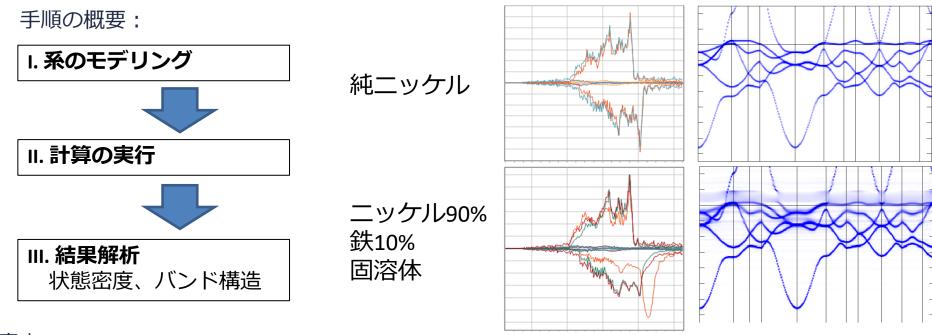
#### 本書について

- 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<u>ビギナーズマニュアル</u>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、まずよくある質問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。
- 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。



#### 概要

• まず、純二ッケルの状態密度、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。

#### 動作環境設定

AkaiKKRインストールマニュアル

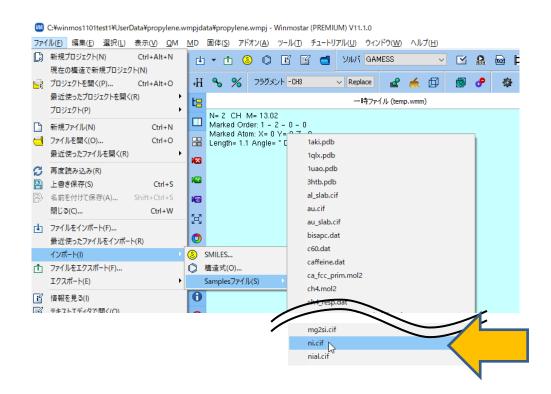
https://winmostar.com/jp/manual jp/installation/AkaiKKR install manual jp win.pdfに従い、AkaiKKRをインストールしてください。

#### I. 系のモデリング(純二ッケル)

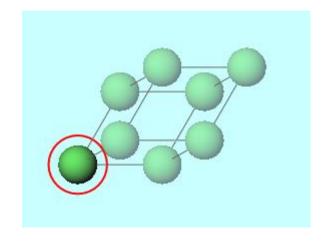
プロジェクトモードはAkaiKKRに対応していないため必ずファイルモードを使用してください。

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。

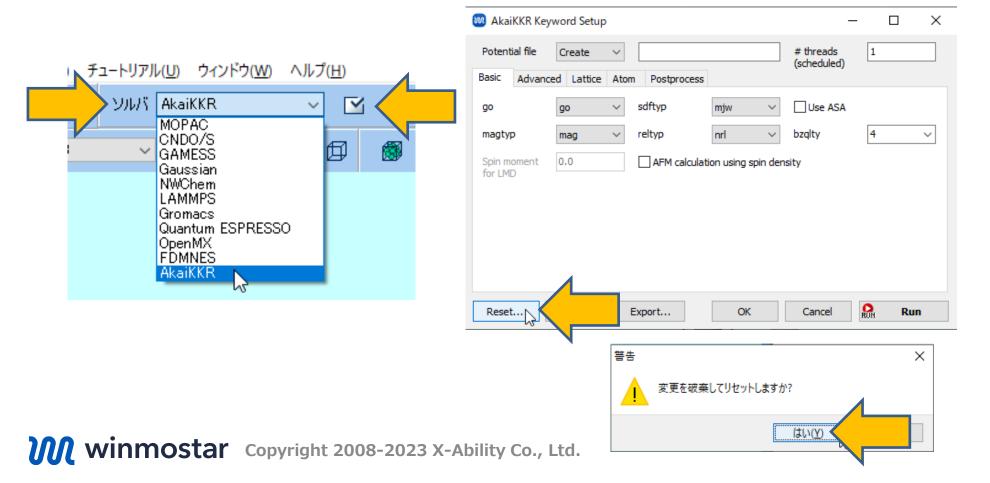
任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。



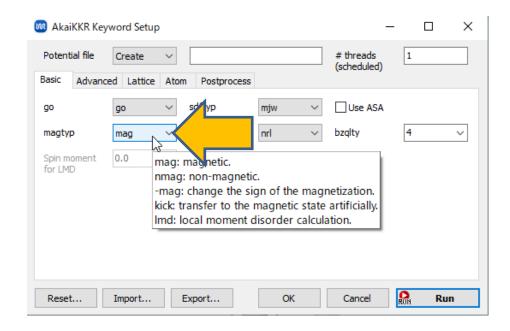


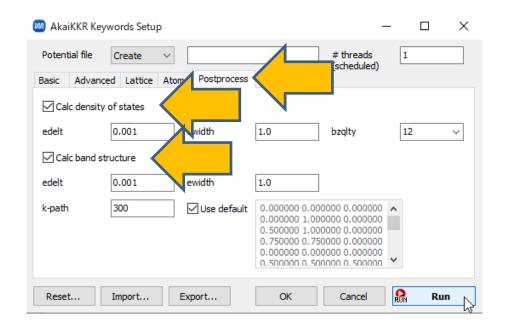


- 1.ツールバーの**ソルバ**からAkaiKKRを選択します。
- 2. **(キーワード設定)** をクリックします
- 3. AkaiKKR Keyword Setupウィンドウ左下のResetをクリックし、はいをクリックします。

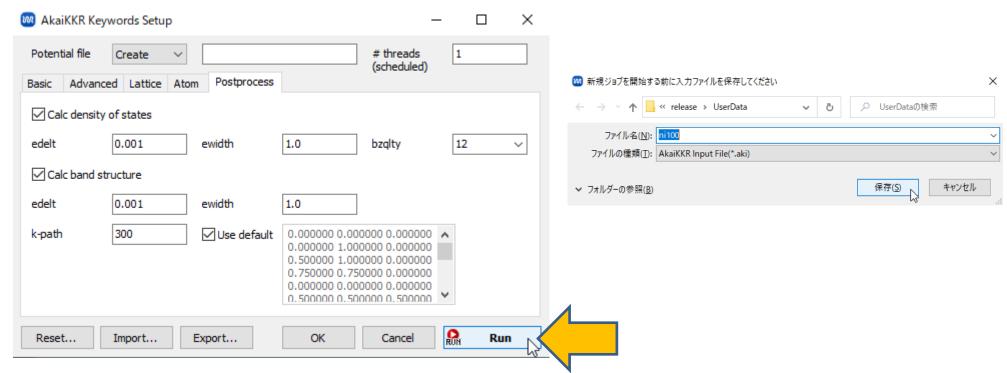


- **1. Basic**タブでmagtypをmagに変更します。
- **2. Postprocess**タブをクリックし、**Calc density of states**と**Calc band structure**にチェッ クを入れます。





- 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。

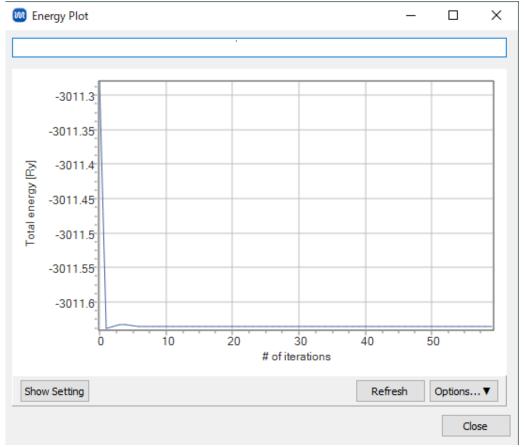


1. **ログを表示**ボタンをクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと計算のログファイルが表示されます。

```
🎒 ni100.ako - 火モ帳
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
                           m \times 1
      400
  data read in
  go=go file=ni100.akd
                   a= 6.62500 c/a= 0.00000 b/a= 0.00000
  brvtvp=fcc
  alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
  edelt= 1.0E-03 ewidth= 1.000 reltyp=nrl
                record=2nd outtyp=update bzglty=4
  maxitr=100 pmix= 0.02300 mixtyp=tchb-brydn
  ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1
  complex energy mesh
   1( -1.0000, 0.0000)
                            2( -0.9998, 0.0027)
5( -0.9933, 0.0163)
                                                     3(-0.9990, 0.0062)
 4( -0.9971, 0.0107)
7( -0.9738, 0.0319)
10( -0.8757, 0.0660)
                                                     6(-0.9862, 0.0234)
                           8(-0.9535, 0.0421)
                                                     9(-0.9220, 0.0536)
                           11( -0.8117, 0.0782)
                                                    12( -0.7292, 0.0889)
 13( -0.6307, 0.0965)
16( -0.3115, 0.0926)
                           14( -0.5224, 0.0999)
                                                   15( -0.4130, 0.0985)
                           17( -0.2245, 0.0835)
                                                    18( -0.1553, 0.0724)
 19( -0.1037, 0.0610)
22( -0.0262, 0.0320)
25( -0.0057, 0.0151)
28( -0.0012, 0.0069)
                           20(-0.0671, 0.0500)
                                                    21( -0.0424, 0.0403)
                           23( -0.0160, 0.0251)
                                                    24( -0.0096, 0.0195)
                           26(-0.0034, 0.0116)
                                                    27(-0.0020, 0.0089)
                          29( -0.0007, 0.0052)
                                                    30( -0.0004, 0.0040)
                                       1行、1列
                                                           100% Unix (LF)
                                                                                   UTF-8
```

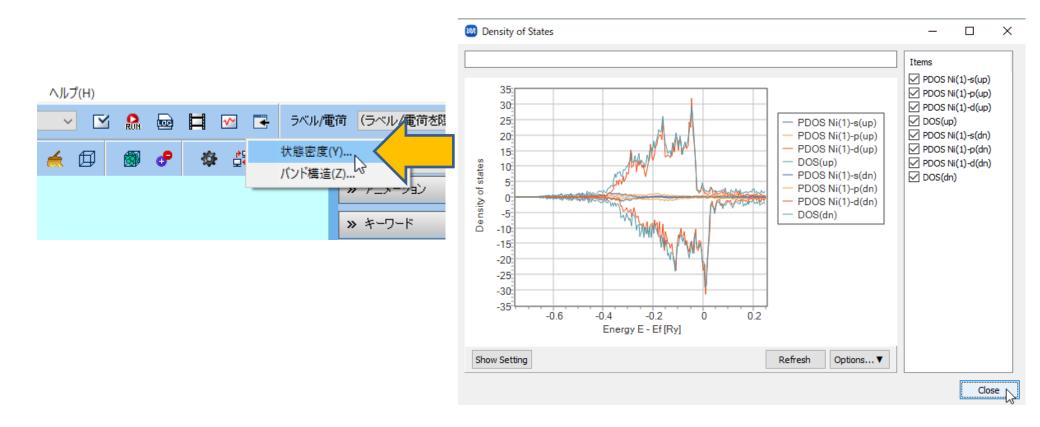
### III.結果解析 SCFエネルギー変化(純二ッケル)

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。



#### III.結果解析 状態密度(純二ッケル)

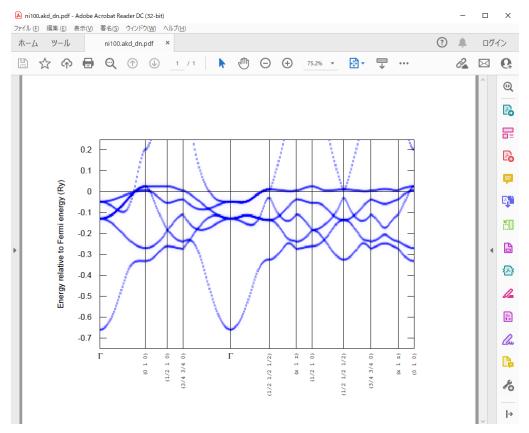
1. **| 結果解析 | 状態密度**をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開くと、状態密度 が表示されます。



### III.結果解析 バンド構造 (純二ッケル)

1. **活果解析|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。

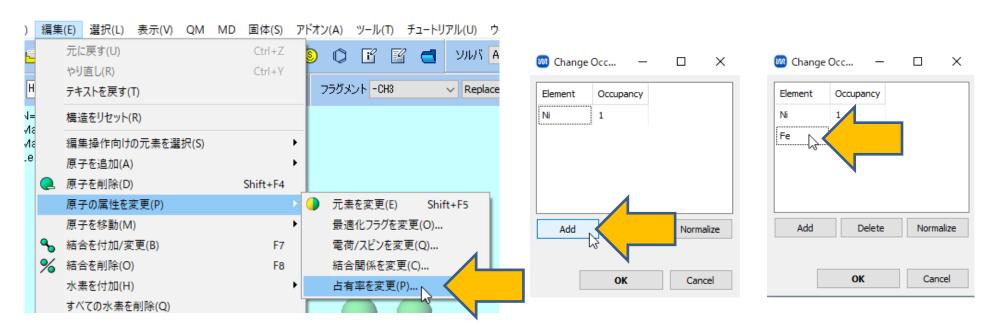




#### IV.系のモデリング(ニッケル-鉄固溶体)

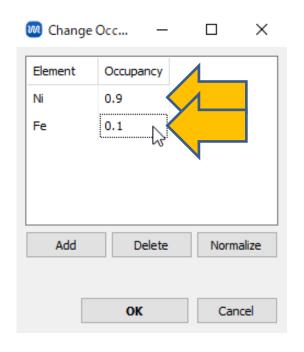
次に、ニッケル 90%-鉄10 %の固溶体を作成します。ここでは純ニッケルの占有率を変更する手順を示しますが、Occupancyが設定されたCIFファイル(Samples¥ni90fe10.cif)を読み込んでも同様の計算が可能です。

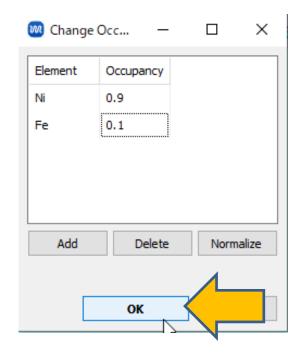
- 1. 編集 | 原子の属性を変更 | 占有率を変更をクリックします。
- 2. Addをクリックします。
- 3. 2行目の**Element**に「Fe」と入力します。



### IV.系のモデリング(ニッケル-鉄固溶体)

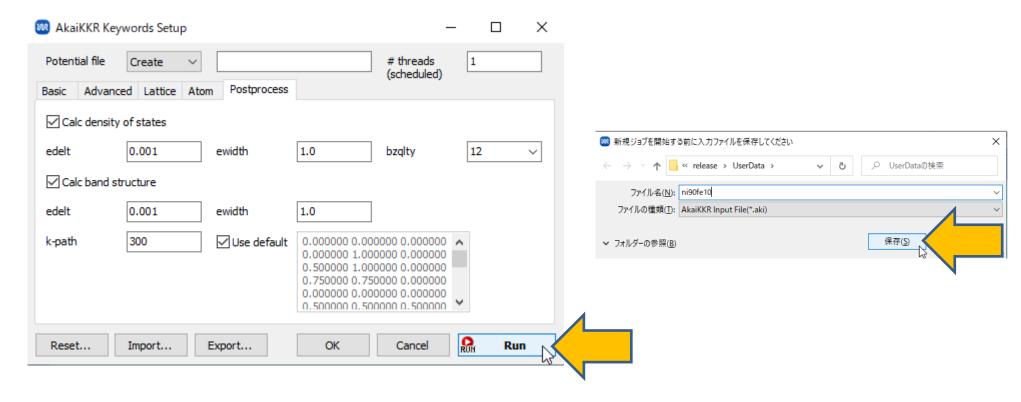
- 1. 1行目のOccupancyに「0.9」、2行目のOccupancyに「0.1」を入力します。
- 2. OKをクリックします。



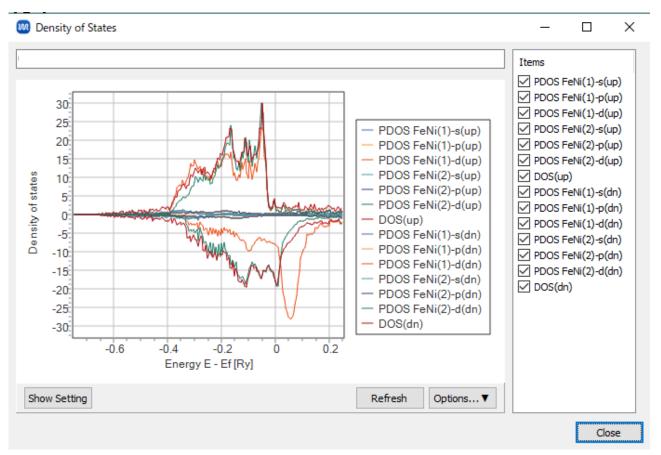


#### V. 計算の実行(ニッケル-鉄固溶体)

- 1. **(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。

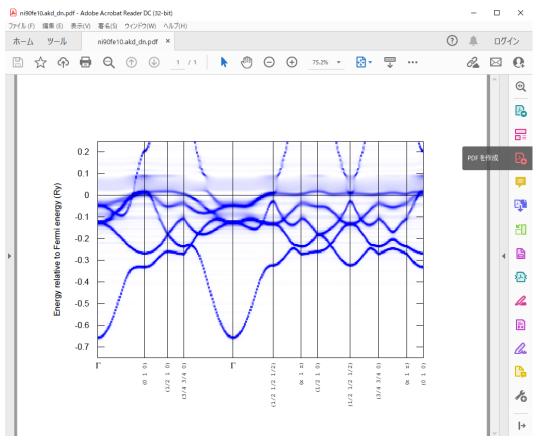


### VI.結果解析 状態密度(ニッケル-鉄固溶体)



### 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。



#### 最後に

各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。



<u>ユーザマニュアル</u>



Winmostar 講習会の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会、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、まずよくある質問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