

## 1 スピン軌道相互作用を無視した Fe の計算

スピン軌道相互作用を無視した Fe の計算は, Wannier90 の tutorial example08 に置いて示されている. ここで用いられている pseudopotential は Fe.jry.pbe.UPF であり, functional の形は PBE, pseudopotential の種類は Full Relativistic でかつ UltraSoft である. また valence band として考慮しているのは 3D, 4S, 4P である.

結果として得られたスピン偏極を含む DOS が下図 1 である. ただしエネルギーのゼロ点をフェルミレベルに合わせてある.

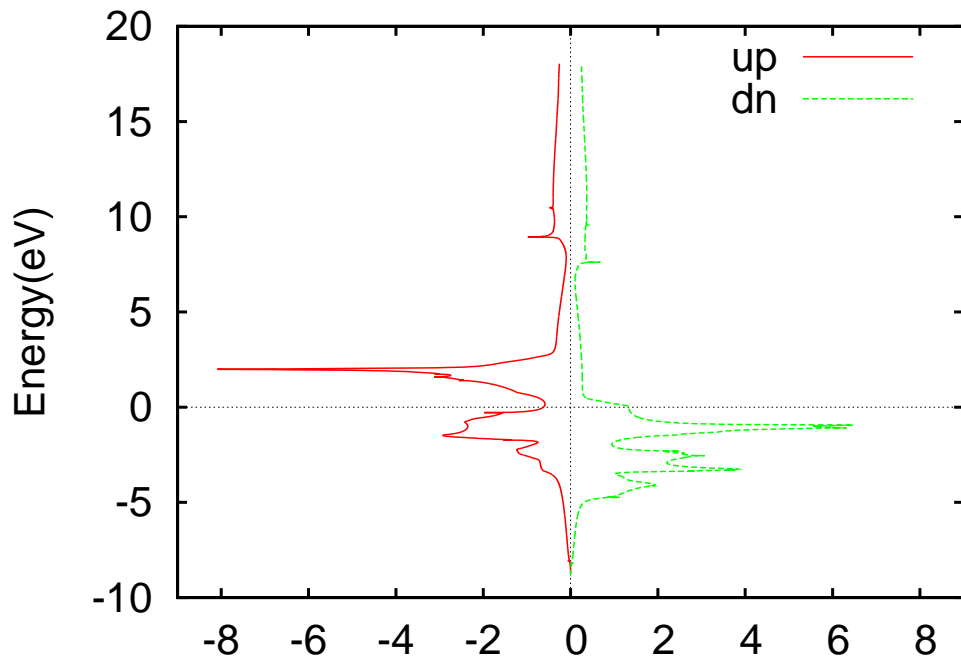


図 1: LS 相互作用を含まない Fe の DOS

系全体の磁化はボーア磁子  $\mu_B$  及びスピン偏極した電子数  $n$  を用いて

$$\begin{aligned} M &= \mu_B (n_{up} - n_{dn}) \\ &= \mu_B \left( \int^{E_F} dE D_{up} - \int^{E_F} dE D_{dn} \right) \end{aligned}$$

となる. これを得られた DOS から計算すると,

$$\begin{aligned} N_{up} &= 5.73278 \\ N_{dn} &= 10.18045 \\ N_{dn} - N_{up} &= 4.44767 \end{aligned}$$

となるから従って

$$\begin{aligned} M &= 5.788 \times 10^{-5} \times 4.44767 \\ &= 2.574 \times 10^{-4} \text{eV/T} \end{aligned}$$

を得る．以上から一原子あたりの磁化，磁気モーメントは

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{M}{2} = 2.224 \times \mu_B \\ &= 1.287 \times 10^{-4} \text{eV/T} \end{aligned}$$

となる．これは実験で得られる値  $2.219\mu_B$  と近くなっている．

一方でバンド図は図 2 となる．赤がスピン up, 緑がスピン dn のバンドを表している．これを見

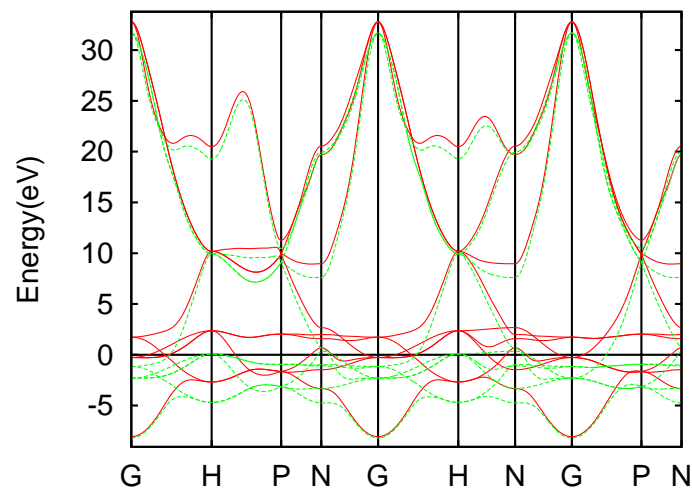


図 2: LS 相互作用を含まない Fe の BAND

てもスピンによってエネルギーが分裂している様子を見ることができる．

## 2 スピン軌道相互作用を考えた Fe の計算

次に，スピン軌道相互作用を考えた計算は，example17 において示されている．スピン軌道相互作用を考える場合，これによってエネルギー準位の縮退が解けることが期待されるのでそれを調べよう．

まず，QE でスピン軌道相互作用を考慮した計算を行うためには，まずは pseudopotential として，scalar relativistic なものではなく，full relativistic なものを使わなければならない．前節で指摘したように今回の計算で使っているのは full relativistic なものなのでこの点については問題ない．次に，input file に次の設定を加える必要がある

```
&system
  lspinorb=.true.
  noncolin=.true.
```

また，diagonalization は example のデフォルト 'cg' では収束せず，'david' に変更する必要がある．  
こうして計算して得られた BAND 図は図 3 である．

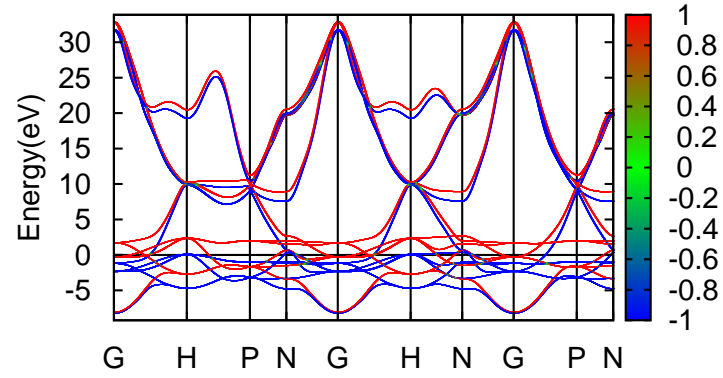


図 3: LS 相互作用を含む Fe の BAND

### 3 Berry 位相の計算

K 点メッシュは 1000 点, 軌道としては  $sp3d2, dxy, dxz, dyz$  を考えている. こうして得られた berry 位相は図のようになった.

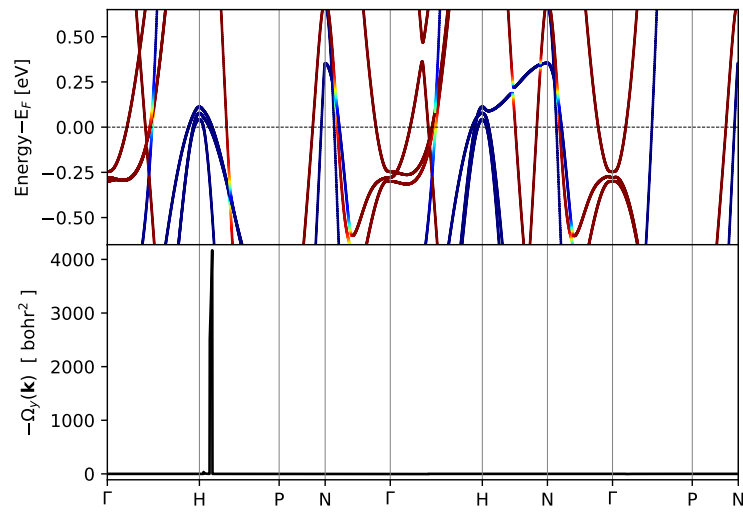


図 4: ベリー位相の  $y$  成分

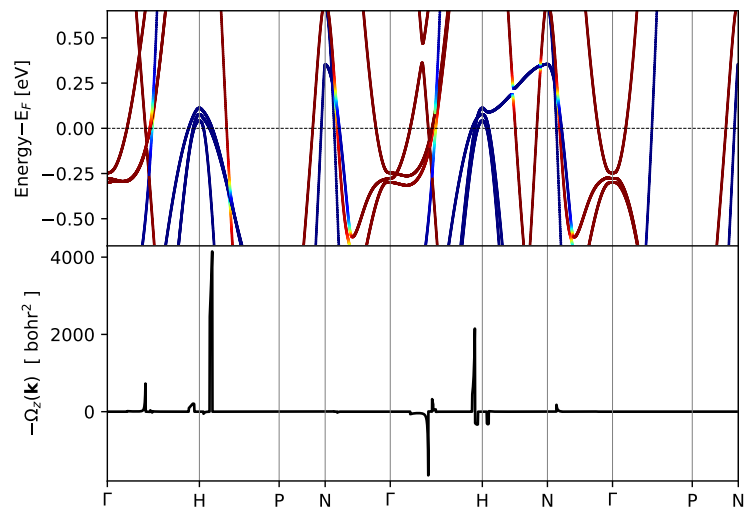


図 5: ベリー位相の  $z$  成分