

# KKR グリーン関数法 AKAIKKR

KKR Hands-On

# 強磁性鉄の計算をしてみる

```
> cp /octfs/apl/kosyu/20221117_AkaiKKR/cpa2021.tgz .  
> tar xvfz cpa2021.tgz  
> cd cpa2021  
> make  
> ./specx<in/fe
```

# アウトプット1

## 計算パラメータおよび読み込まれたデータ

```
ru> specx<in/fe  
6-Nov-2022  
22:59:50  
meshr mse ng mxl  
400 35 21 3
```

meshr: 動径方向の座標のメッシュ数  
mse: 複素積分のエネルギー メッシュ数  
ng: チェビシェフ展開の次数  
mxl: 考慮される最大の散乱角運動量

インプットとして与えた  
データ

```
data read in  
go=go file=data/fe  
brvtyp=bcc a= 5.27000 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 bzqlty=4  
maxitr= 50 pmix= 0.02300 mixtyp=tchb-brydn  
ntyp= 1 natm= 1 ncmpx= 1
```

# アウトプット2

## 複素エネルギー経路

ewidthの値が入る

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)
31( -0.0002, 0.0031)	32( -0.0001, 0.0023)	33( -0.0001, 0.0018)
34( -0.0000, 0.0014)	35( -0.0000, 0.0010)	

edeltの値が入る

# アウトプット3

## ポテンシャルデータを保存するファイルと格子の情報

file to be accessed=data/fe  
created

指定されたファイルがなかった  
ので新しいファイルを作成

lattice constant

bravais=bcc a= 5.27000 c/a= 1.0000 b/a= 1.0000

alpha= 90.00 beta= 90.00 gamma= 90

unit cell volume= 73.18159(a.u.)

volume filling= 68.0%

マフィンティン球(MT球)に  
よって埋められる体積は  
全体の68%

primitive translation vectors (in units of a)

a=(-0.50000 0.50000 0.50000)

b=( 0.50000 -0.50000 0.50000)

c=( 0.50000 0.50000 -0.50000)

基本並進ベクトル  
単位は a

reciprocal lattice vectors (in units of 2\*pi/a)

ga=( 0.00000 1.00000 1.00000)

gb=( 1.00000 0.00000 1.00000)

gc=( 1.00000 1.00000 0.00000)

逆格子ベクトル  
単位は  $2\pi/a$

# アウトプット4

各サイトを占める原子の情報, 格子の対称性, k点の数

type of site

type=Fe rmt= 0.43301 field= 0.000 lmxtyp= 2  
component= 1 anclr= 26.00 conc= 1.0000

Feという名前のタイプを作った。このタイプの位置は鉄によって100%占められている

atoms in the unit cell

position= 0.00000000 0.00000000 0.00000000 type=Fe

そのタイプの位置情報(原子位置)

\*\*\*wrn in spmain...eof detected; data generated

\*\*\*msg in spmain...new ew, ez generated

ew= 0.19997 ez= 1.25000 ...

エネルギー ウィンドウ  
の中心と幅

preta= 0.35542 eta= 0.35542

許される対称操作

symop E C4\*3 C2\*3 C4^3\*3 C3\*4 C3^2\*4 C2 \*b

g: 直接  
u: 反転

g 1  
u 1

last= 243 np= 19 ngpt= 273 nrpt= 169 nk= 29 nd=

既約ゾーン内  
でのk点数

# アウトプット5

## 原子の計算

atomic potential generated

```
itr= 1      rms error =  0.245  
itr= 2      rms error = -0.412  
      . . . (途中省略) . . .  
itr= 15     rms error = -6.237  
interval= 15    cpu time=    0.00 sec  
nuclear charge=26.00
```

原子のLDA/GGA計算.  
15回の反復計算で収束

nl	cnf	energy
1s	2.000	-508.5203
2s	2.000	-59.2074
2p	6.000	-51.1807
3s	2.000	-6.8027
3p	6.000	-4.4563
3d	6.000	-0.6696
4s	2.000	-0.4930

求まった原子の  
エネルギー準位.  
単位 Ry

# アウトプット6

## その他の情報

record 1 will be overlayed by input and  
record 2 will be replaced by new output.

1番目でレコードはインプット  
ポテンシャルに置き換わる.  
2番目のレコードは計算で得ら  
れた新しいポテンシャルになる.

core configuration for Z= 26

state	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	5s	5p	4f	5d	6s	6p	5f	6d	7s
up	1	1	3	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
down	1	1	3	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

コア準位の占拠数

ポテンシャルファイルの構造  
バイナリデータからなる2個のレコードを含む  
レコード1：一つ前の計算で得られたデータ  
レコード2：最新の計算で得られたデータ

# アウトプット7

## 反復計算開始

\*\*\*\*\* self-consistent iteration starts \*\*\*\*\*

Fe

```
itr= 1 neu= -2.5047 moment= 4.0909 te= -2523.19969054 err= 0.502
itr= 2 neu= -1.6328 moment= 2.5475 te= -2522.86071488 err= -0.371
itr= 3 neu= -0.3261 moment= 2.6308 te= -2522.80866273 err= -0.443
itr= 4 neu= 0.0541 moment= 2.5226 te= -2522.80177581 err= -0.367
itr= 5 neu= 0.0943 moment= 2.5160 te= -2522.80050661 err= -0.335
itr= 6 neu= 0.0459 moment= 2.4553 te= -2522.80806361 err= -0.454
itr= 7 neu= -0.1653 moment= 2.2229 te= -2522.81662663 err= -0.640
itr= 8 neu= -0.3538 moment= 1.9560 te= -2522.82374971 err= -1.132
```

反復数

系の磁気  
モーメント( $\mu_B$ )

全エネルギー (Ry)

系内の全電荷数.  
ゼロなら電気的中性  
が保たれている

インプットとアウトプット  
ポテンシャルの差の対数

# アウトプット8

## 反復計算収束

```
itr= 46 neu= -0.0001 moment= 2.1598 te= -2522.81762151 err= -5.193  
itr= 47 neu= -0.0001 moment= 2.1598 te= -2522.81762150 err= -5.557  
itr= 48 neu= -0.0001 moment= 2.1598 te= -2522.81762150 err= -6.104  
interval= 48    cpu time=    0.31 sec      • • •  
sdftyp=mjw    reltyp=nrl    dmpe= 0.10000
```

48回の反復計算で  
収束

Fe

```
itr= 48 neu -0.0001 chr,spn 8.0000 2.1598 intc,ints 1.0307 -0.0270  
rms err= -6.140 -6.104  
ef= 0.7686596 0.7779665 def= 5.0213887 17.8605662  
band energy= 4.763028241 total energy= -2522.817621496  
magnetization= 2.3210 T
```

フェルミエネルギー  
(スピンの向きによって  
差があるのはエネルギー原点が違うため)

フェルミエネルギー  
での状態密度

全エネルギー (Ry)

格子間隙に溜った  
電子数とスピニモー  
メント

# アウトプット9

## 各サイトのローカルな情報

\*\*\* type-Fe Fe (z= 26.0) \*\*\*

core charge in the muffin-tin sphere = 17.9774112

valence charge in the cell (spin up ) = 0.19393(s) 0.19656(p) 4.19816(d)

valence charge in the cell (spin down) = 0.20117(s) 0.22849(p) 1.97357(d)

total charge= 24.96929 valence charge (up/down)= 4.58865 2.40323

spin moment= 2.18542 orbital moment= 0.00000

orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

MT球内の価電子の  
角運動量成分

MT球内の  
全価電子数

total chargeが 26 でないのは  
格子間隙位置にも電子が  
溜まっているため

MT球内の  
スピニモーメント

core level (spin up )

-507.0825055 Ry(1s)	-57.8242188 Ry(2s)	-49.7860958 Ry(2p)
-5.4714121 Ry(3s)	-3.1285211 Ry(3p)	

core level (spin down)

-507.0728003 Ry(1s)	-57.7222519 Ry(2s)	-49.7063113 Ry(2p)
-5.2798012 Ry(3s)	-2.9425195 Ry(3p)	

# アウトプット10

## 各サイトのローカルな情報 超微細構造

hyperfine field of Fe

-274.068 kG (core= -219.153 kG valence= -54.915 kG orbital= 0.000 kG )

core contribution

-18.434 kG(1s) -491.698 kG(2s) 290.979 kG(3s)

原子核位置で電子によって作られる磁場  
NMR等の共鳴周波数に対応(超微細磁場)

charge density at the nucleus

11820.4209 (core= 11814.6730 valence= 5.7479 )

core contribution

10701.4235(1s) 972.7172(2s) 140.5324(3s)

原子核位置での電子密度  
NMR等でのアイソマーシフトに対応

# アウトプット11

## 計算に関する情報

sbtime report

routine	1	2	3	4	...
count	864	864	864	96	
cpu(sec)	3.60	1.19	1.32	0.13	

特定のルーチン  
に関する情報.  
時間は実時間 ×  
スレッド数

OS: Linux  
Host: ru  
Machine: x86\_64  
numcor: 36

elapsed time      0.38 sec ( 9 threads)

OSや用いられた  
マシーンの情報

計算にかかった実時間  
と用いられたスレッド数

# Input file

```
c          Fe
c      go    data/fe
c
c      brvtyp   a      c/a   b/a   alpha   beta   gamma
c      bcc      5.27  ,
c      edelt   ewidth
c      0.001   1
c
c      outtyp   bzqlty  maxitr  pmix
c      update   4        50      0.023
c
c      ntyp
c      1
c
c      type    ncmp
c      Fe      1       1       0.0     2
c                           26     100
c
c      natm
c      1
c
c      atmicx
c      0       0       0       type
c      Fe
c
```

第1カラムが c の  
行はコメント行

空行は読み飛ばす

# Input file

```
#-----Fe-----  
go    data/fe  
#-----  
#   brvtyp      a  
bcc      5.2  
#-----  
#   edelt      ewidth  
0.001     1.0      nrl      mJw      mag      record  
#-----  
#   outtyp      bzqlty      maxitr      pmix  
update      4          50      0.023  
#-----  
#   ntyp  
1  
#-----  
#   type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
Fe        1          1          0.0        2          26      100  
#-----  
#   natm  
1  
#-----  
#   atmidx      type  
0          0          0          Fe  
#-----
```

第1カラムが#  
の行もコメント行

# Input file

```
go    data/fe

bcc      5.27  ,      ,      ,      ,      ,      ,
0.001    1.0   ,      nrl      ,      mjh      ,      mag      ,      2nd
update   4      ,      50      ,      0.023
1
Fe      1      1      0.0      2
                                26      100
1
0      0      0      Fe
```

コメントを外すと  
こうなる

1個以上の空白または  
カンマがデータの区切り.

# Input file

```
go data/fe bcc 5.27,,,,,,0.001 1.0 nrl mjw mag 2nd  
update 4 50 0.023 1 Fe 1 1 0.0 2 26 100  
1 0 0 0 Fe
```

続く空白は  
1個の空白と同じ

改行も一個の空白  
と同じ、どこで改行  
しても良い

インプットは順序づけられたデータの並び。  
ほとんど全てのデータやキーワードは省略  
可能だが、省略したことを示すために  
データ区切りのカンマを入れておく

# Input file

インプットは実際には標準入力（キーボードからの入力）

```
> specx (or ./specx, run specx, etc.)  
go  
data/fe  
bcc  
5.27,,,,,  
0.001 1.0 nrl mjw mag 2nd  
update 4 50 0.023 1 Fe 1 1 0.0 2 26 100  
1 0 0 0  
Fe  
(計算開始)  
...  
Ctl-d  
>
```

特にインプットファイルを用意しなくても計算できる

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go  data/fe  
c      brvty  
c      bcc  
c      edelt  
c      0.001  
c      1.0   HFL  HJW  mag  znu  
c      outtyp bzqlty maxitr pmi  
c      update 4       50  
c      ntyp  
c      1  
c      type   ncmp   rmt  
c      Fe     1       1     0.0  
c      26    100  
c      natm  
c      1  
c      atmicx  
c      0       0       0       type  
c      Fe
```

go : SCF計算の開始

dos : 状態密度計算

spc : エネルギー分散の計算

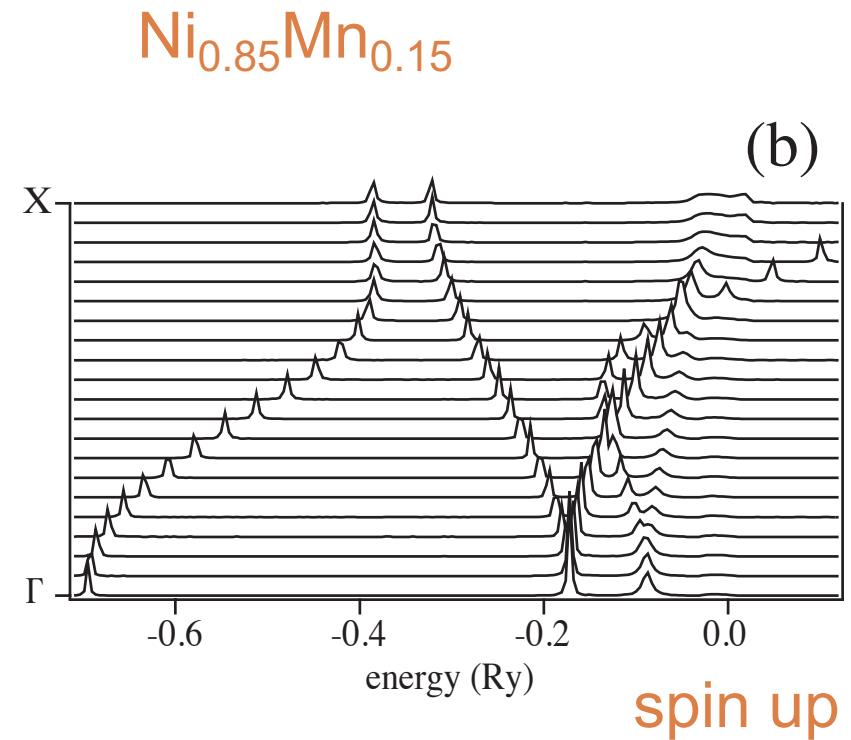
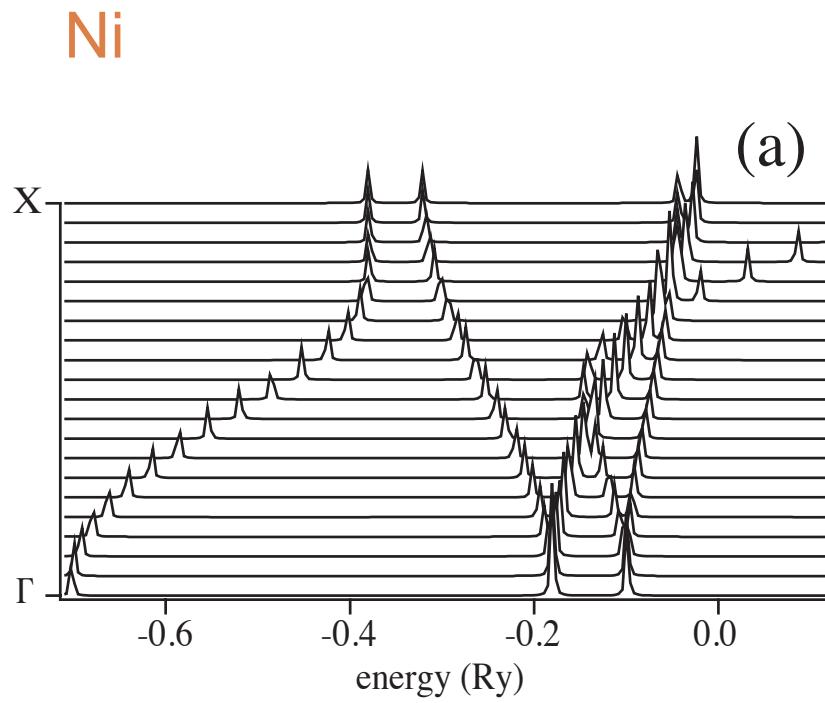
scf: self-consistent field

dos: density of states

spc: Bloch spectral function

# ブロッホ・スペクトル関数

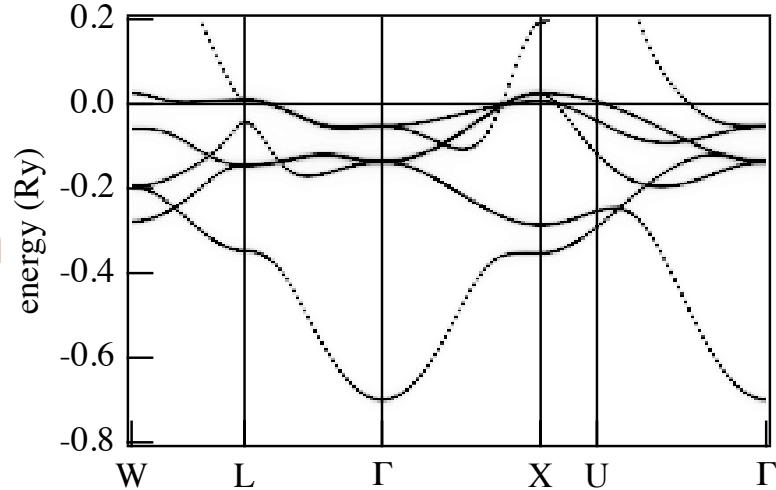
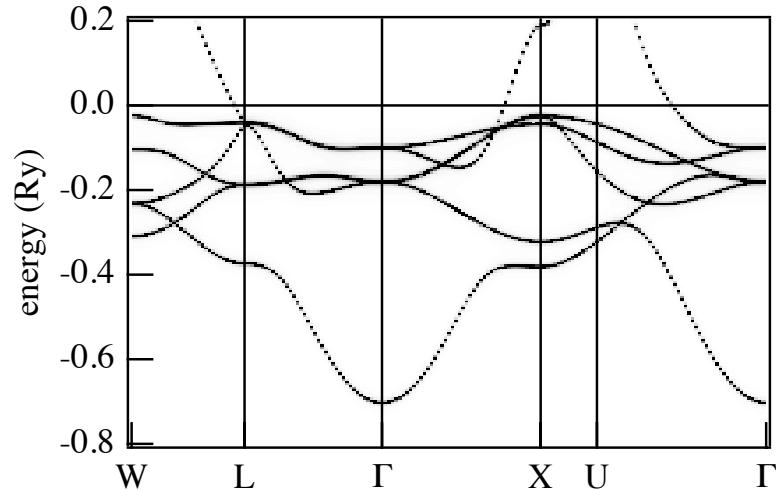
- 例えば, NiとNiMn合金のブロッホ・スペクトル関数



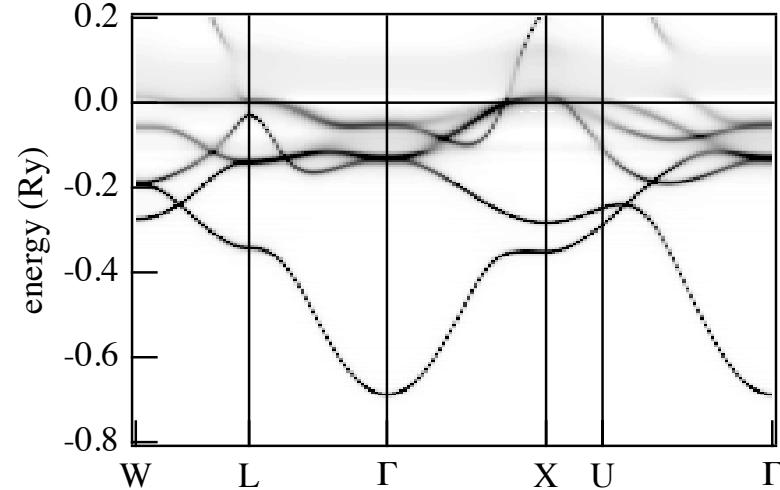
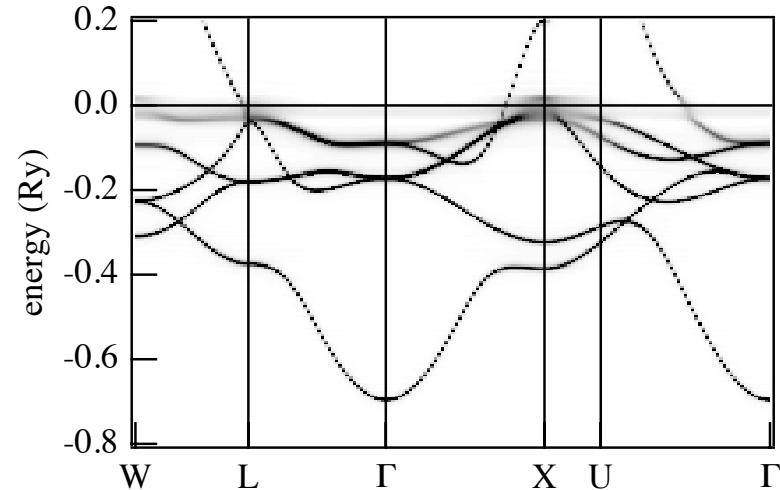
# ブロッホ・スペクトル関数

## ■ エネルギー分散

Ni



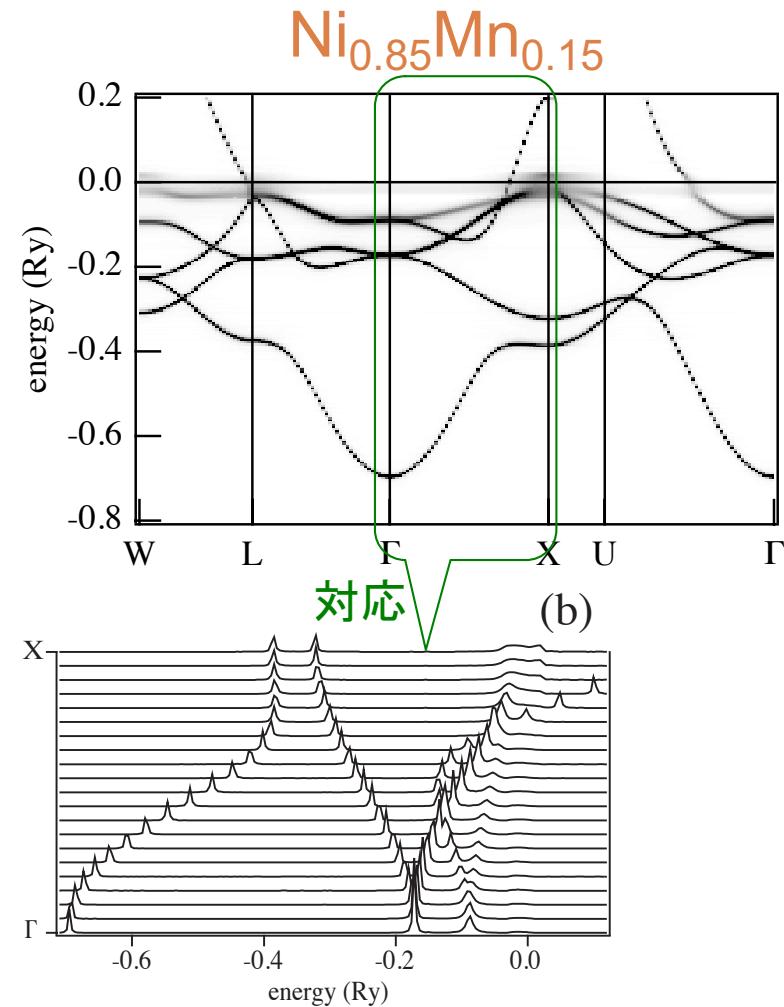
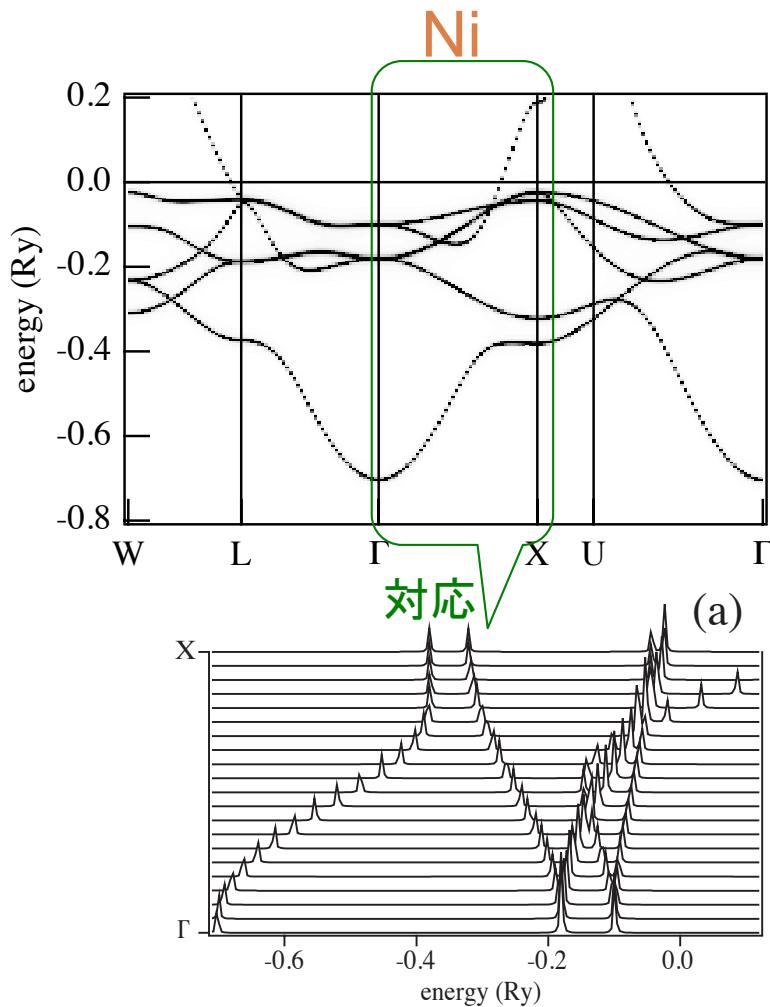
$\text{Ni}_{0.85}\text{Mn}_{0.15}$



# ブロッホ・スペクトル関数

- エネルギー分散とブロッホ・スペクトル関数の対応

spin up



# Input file

データファイル(どんなファイル、  
ディレクトリでもOK)

```
c          go    data/fe
c
c      brvtyp      a        c/a     b/a   alpha    beta   gamma
      bcc      5.27 , , , , , ,
c
c      edelt     ewidth    reltyp    sdftyp    magtyp   record
      0.001     1.0       nrl       mjw       mag      2nd
c
c      outtyp    bzqlty   maxitr   pmix
      update     4         50      0.023
c
c      ntyp
      1
c
c      type     ncmp     rmt     field    mxl    anclr   conc
      Fe       1        1       0.0      2           26      100
c
c      natm
      1
c
c      atmicx
      0          0          0          type
      Fe
```

# Input file

```
c          go    data/fe      Fe  
c          brvtyp   a      c/a  
      bcc     5.27 , , , , ,  
c          edelt  0.001      record  
c          outtyp update      4 50 0.025 2nd  
c          ntyp  
c          fcc: face centered cubic 面心立方  
          bcc: body centered cubic 体心立方  
          hcp: hexagonal closed packed 六方密  
          sc: simple cubic 单纯立方  
          bct: body centered tetragonal 体心正方  
          st: simple tetragonal 单纯正方  
          などなど  
c          atmicx 0 0 0 type  
c          Fe
```

わからなければブランクでも  
良い。データベースを備えて  
いて適当に設定される

fcc, bcc, hcp, sc, bct, st, 等  
詳しくはマニュアル参照

fcc: face centered cubic 面心立方  
bcc: body centered cubic 体心立方  
hcp: hexagonal closed packed 六方密  
sc: simple cubic 单纯立方  
bct: body centered tetragonal 体心正方  
st: simple tetragonal 单纯正方  
などなど

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp      a      c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
      bcc       5.27  
c-----  
c      edelt     ewidt  
      0.001     1.0  
      r       m       m       m       m       m  
c-----  
c      outtyp    bzqlty   maxitr   pmix  
      update     4        50       0.023  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type      ncmp  
      Fe       1       1  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0       0       0       type  
      Fe  
c-----
```

格子定数  $a$ , わからなければ  
0で良い

コード内にデータベース  
を備えていて適当な値  
が設定される

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp      a          c/a     b/a     alpha     beta     gamma  
      bcc       5.27 ,       ,       ,       ,       ,       ,  
c-----  
c      edelt      ewidth  
      0.001      1.0  
c-----  
c      outtyp      bzqlty  
      update      4  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
      Fe        1         1        0.0        2  
                                26        100  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0          0          0          type  
                                Fe  
c-----
```

スレータの原子単位  
長さ : 1 bohr  $\simeq 0.529 \text{ \AA}$   
エネルギー : 1 Ry  $\simeq 13.6 \text{ eV}$

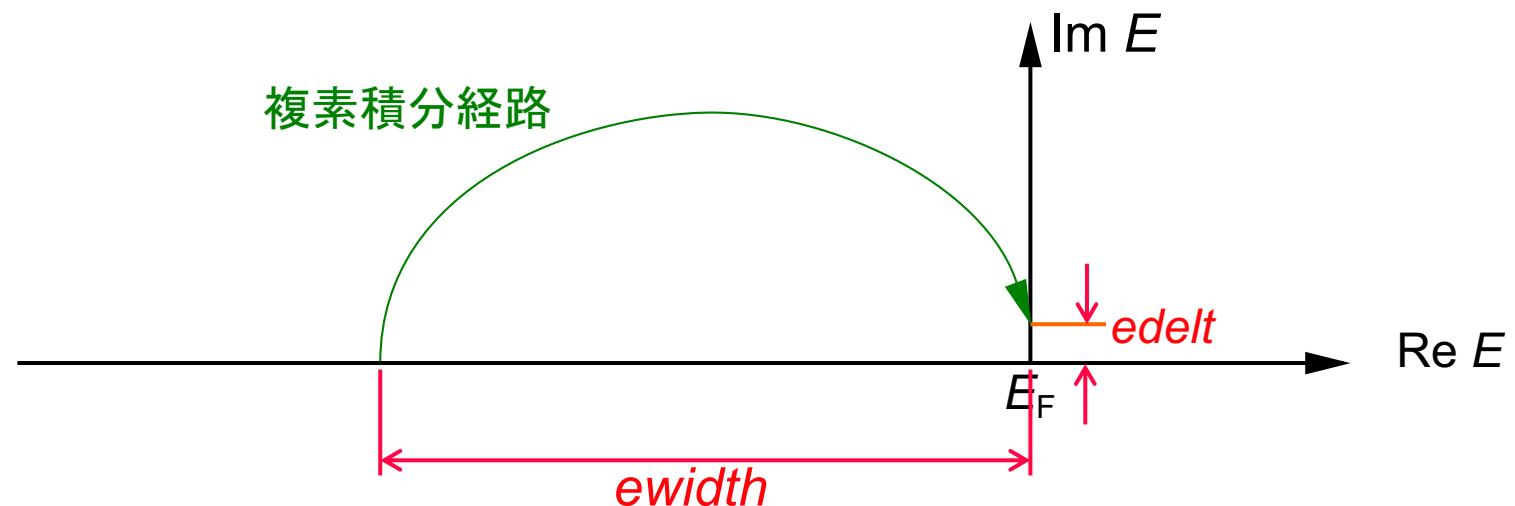
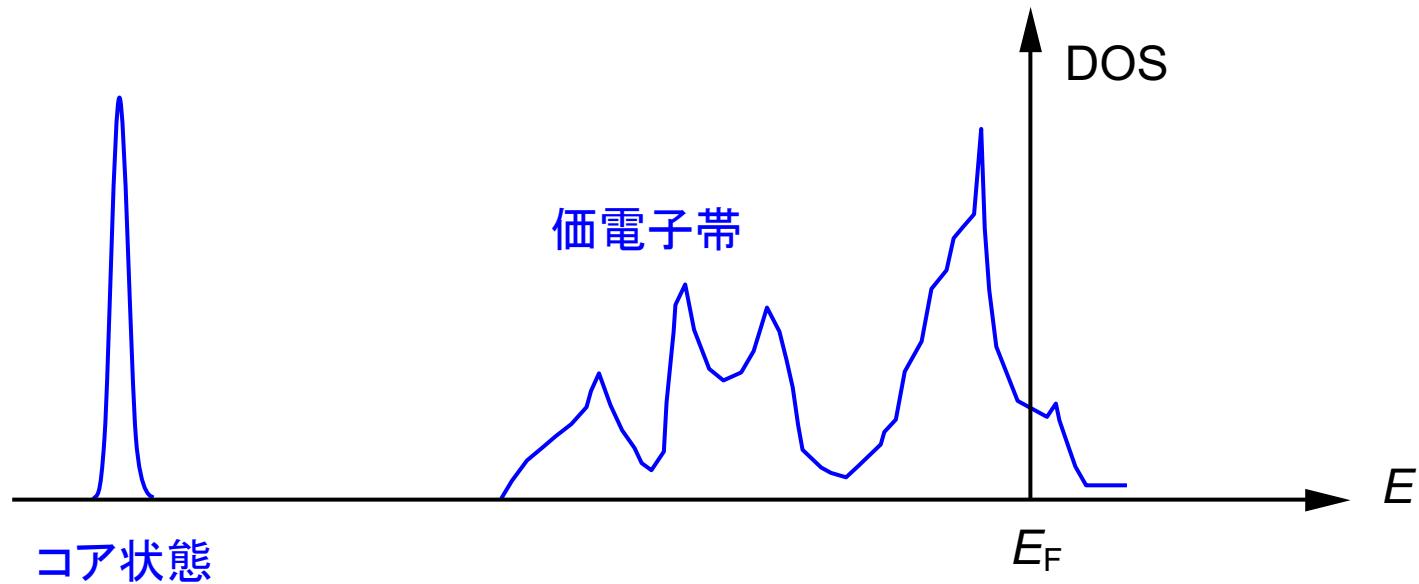
# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp      a      c/a      b/a      alpha      beta      gamma  
      bcc      5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c      edelt      ewidth     rel+      dftyp      magtyp      record  
      0.001     1.0      njw      mag      2nd  
c-----  
c      outtyp      update  
c-----  
c      ntyp      1  
c-----  
c      type      ncmp      ninc      field      maxl      direct      conc  
      Fe      1      1      0.0      2  
                                26      100  
c-----  
c      natm      1  
c-----  
c      atmidx      0      0      type  
                                Fe  
c-----
```

bcc構造ではc/a, b/a,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ は  
1, 1, 90, 90, 90と決まっている  
から省略

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp      a      c/a      b/a      alpha      beta      gamma  
      bcc      5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c      edelt      ewidth      reltyp      sdftyp      magtyp      record  
      0.001     1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c      outtyp      bzq  
      update      4  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
      Fe       1        1      0.0       2  
                           26      100  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0          0          0          type  
                           Fe  
c-----
```



# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001   1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp  bzq  
  update   4  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp   rmt  
  Fe      1      1  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmidx  
  0      0      0      type  
          Fe  
c-----
```

注意深く設定する必要

計算失敗の多くはこの  
不適切な設定に起因

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001   1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty  maxitr  
  update     4  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp   rr  
  Fe      1      1  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicsx  
  0  
c-----
```

nrl : 非相対論取り扱い  
sra : スカラー相対論的  
srals : sra+スピン軌道相互作用

26 100

nrl: non relativistic  
sra: scalar relativistic

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp   a       c/a     b/a     alpha    beta    gamma  
      bcc      5.27  ,     ,     ,     ,     ,  
c-----  
c      edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
      0.001   1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c      outtyp  bzqlty   maxitr   p...  
      update   4        50      0.023  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type    ncmp    rmt     field    m...  unclr   conc  
      Fe      1       1       0.0     0.0  
c-----  
c      natm  
c-----  
c      a...  
c-----  
c      alpha  
c-----  
c      rho  
c-----
```

用いるLDA/GGA. mjw,  
vhb, vwn, gga91, pbe, 等

mjw: Morrozi-Janak-Wiliams

vhb: von Berth-Hedin

vwn: Vosko-Wilk-Nusair

gga91: generalized gradient  
approximation 91

pbe: Perdew-Burke-Ernzerhof

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp   a       c/a     b/a     alpha    beta    gamma  
      bcc      5.27 , , , , , ,  
c-----  
c      edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
      0.001   1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c      outtyp  bzqlty  
      update   4  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type    ncmp    rm  
      Fe      1       1      0.0    2  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0       0  
c-----
```

mag : 磁性あり  
nmag : 非磁性  
lmd : 不規則局所磁気モーメント

mag: magnetic  
nmag: non magnetic  
lmc: local moment  
disordered state

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001   1.0     nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr  
  update    4        50  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp    rmt    field  
  Fe      1       1      0.0    2  
          26     00  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx  
  0       0  
c-----
```

init : 新規ポテンシャルデータ  
2nd : 最新データを使用  
1st : 一つ前のデータを使用

最新とその一つ前の2組  
のデータが常に保存され  
ている。

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,    ,     ,     ,     ,     ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001    1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update    4        50      0.023
```

update : ポテンシャルデータを上書き保存

quit : 保存しない

26 100

```
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx           type  
  0      0      0      Fe  
c-----
```

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001    1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update     4        50      0.023  
c-----  
c  ntyp      1  
c-----  
c  type      nc  
  Fe        1  
c-----  
c  natm      1  
c-----  
c  atmicx          type  
  0        0        0        Fe  
c-----
```

k 積分(ブリルアン・ゾーン内の積分)  
の質(精度)を指定.  
k点のサンプル数に対応する  
(k点が4個という意味ではない).

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp      a          c/a     b/a     alpha     beta     gamma  
  bcc       5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c  edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record  
  0.001      1.0        nrl        mjw        mag        2nd  
c-----  
c  outtyp     bzqlty     maxitr     pmix  
  update      4  
c-----  
c  ntyp      1  
c-----  
c  type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr     conc  
  Fe        1         1        0.0        2  
                           26        100  
c-----  
c  natm      1  
c-----  
c  atmicx           type  
  0            0            0            Fe  
c-----
```

反復計算の最大反復数

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001    1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update     4        50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp   rmt   field  
  Fe      1      1      0.0  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----
```

チエビシェフ加速やブロイデン加速に用いるパラメータ. 例えば,

0.023 (最初チエビシェフそれからブロイデン)

0.023tch (チエビシェフだけ)

0.023bry (ブロイデンだけ)

0.023tchbry (0.023とするのと同じ)

0.023は収束を制御するパラメータ.

一般には大きいほど収束は速い.

単純な系なら0.035くらいで大丈夫であるが,  
大きなサイズの系では0.001以下にする場合もある.

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp      a        c/a    b/a    alpha    beta   gamma  
  bcc       5.27 ,     ,     ,     ,     ,     ,  
c-----  
c  edelt      ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001     1.0       nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp     bzqlty   maxitr   pmix  
  update     4         50       0.023  
c-----  
c  ntyp      1  
c-----  
c  type      ncmp     rmt     field    mxl    anclr  conc  
  Fe       1         1       0.0     2  
c-----  
c  natm      1  
c-----  
c  atmicx          type  
  0           0           0       Fe  
c-----
```

異なるタイプの位置の数

結晶学的に  
同等でない位置

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp      a      c/a      b/a      alpha      beta      gamma  
  bcc      5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c  edelt      ewidth      reltyp      sdftyp      magtyp      record  
  0.001      1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp      bzqlty      maxitr      pmix  
  update      4      50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
  Fe      1      1      0.0      2  
                                26      100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx          type  
  0          0          0      Fe  
c-----
```

タイプに付ける任意の名前

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp      a        c/a    b/a    alpha    beta    gamma  
  bcc       5.27 ,     ,     ,     ,     ,     ,  
c-----  
c  edelt      ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001     1.0       nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp     bzqlty   maxitr   pmix  
  update     4         50       0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp     rmt     field    mxl    anclr   conc  
  Fe       1         1       0.0     2           26      100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx          type  
  0            0            0        Fe  
c-----
```

そのタイプの位置を  
占める原子の種類の数

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c  
c  brvt+/-
```

マフィン・ティン半径は意図的に設定するのでなければゼロを指定するか省略しておいて良い。

ユニットセルに複数の異なった原子があるときには、備えられたイオン半径のデータベースを参照して適当な値が設定される。

```
c-----  
c      1  
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      m.      unclr      conc  
c      Fe        1          1          0.0        2          26        100  
c-----  
c      natm  
c      1  
c-----  
c      atmicx  
c      0          0          0          type  
c-----  
c-----
```

マフィン・ティン半径(単位は格子定数  $a$ )。0とすると自動的に設定

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp      a          c/a      b/a      alpha      beta      gamma  
      bcc       5.27 , , , , , ,  
c-----  
c      edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record  
      0.001     1.0        nrl        mjw  
c-----  
c      outtyp     bzqlty     maxitr     pmi  
      update      4          50        0.02  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      m1      unclr      conc  
      Fe        1          1        0.0        2  
      26        1010  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0  
c-----
```

ゼーマンエネルギーで  
表示した外部磁場.  
1Ryは $2.351 \times 10^5$  T

反強磁性などの磁気構造を指定  
したいときには、磁気モーメントの  
方向が安定するまで反復計算の  
初期に0.05程度の値を入れる必  
要がある

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp   a       c/a     b/a     alpha    beta    gamma  
      bcc      5.27  ,     ,     ,     ,     ,  
c-----  
c      edelt   ewidth   reltyp   sdf+vn  mc  
      0.001   1.0      nrl      -       -  
c-----  
c      outtyp  bzqlty  
      update   4  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type    ncmp    rmt     field    mxl    anclr   conc  
      Fe      1       1       0.0     2      26      100  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0       0       0       type  
                  Fe  
c-----
```

2を指定するとd波の散乱まで  
が考慮される。より精度の高い計  
算がしたければ3を指定すれば  
f波散乱まで考慮される

散乱のt行列がゼロ  
でないとする最大の  
角運動量

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001   1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update    4        50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp   rmt   field   mxl   anclr   conc  
  Fe      1      1     0.0     2           26     100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx  
  0      0  
c-----
```

そのタイプの位置を  
占める原子の原子番号

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp      a        c/a     b/a     alpha     beta     gamma  
  bcc       5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c  edelt      ewidth    reltyp    sdftyp    magtyp    record  
  0.001      1.0       nrl       mjw       mag       2nd  
c-----  
c  outtyp     bzqlty    maxitr    pmix  
  update      4         50        0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp      rmt      field     mxl     anclr    conc  
  Fe        1         1         0.0      2           26      100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx  
  0         0  
c-----
```

その原子がそのタイプの位置を占める確率,  
あるいは濃度

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c      brvtyp      a          c/a     b/a     alpha     beta     gamma  
      bcc       5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c      edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record  
      0.001     1.0        nrl        mjw        mag        2nd  
c-----  
c      outtyp     bzqlty     maxitr     pmix  
      update      4          50        0.023  
c-----  
c      ntyp  
      1  
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
      Fe        1         1        0.0        2  
                                26        100  
c-----  
c      natm  
      1  
c-----  
c      atmicx  
      0  
c-----
```

ユニットセルあたりの原子数  
(異なる原子位置の数)

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp     a        c/a    b/a    alpha    beta    gamma  
  bcc      5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c  edelt     ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001     1.0       nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp    bzqlty   maxitr   pmix  
  update     4         50       0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp     rmt     field    mxl    anclr   conc  
  Fe       1         1       0.0     2                  26     100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx          type  
  0           0           Fe  
c-----
```

原子の位置

# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp      a      c/a      b/a      alpha      beta      gamma  
  bcc      5.27 , , , , , , ,  
c-----  
c  edelt      ewidth      reltyp      sdftyp      magtyp      record  
  0.001      1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp      bzqlty      maxitr      pmix  
  update      4      50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
  Fe      1      1      0.0      2  
          26      100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx  
  0      0      0      type  
          Fe  
c-----
```

その位置を占めるタイプ

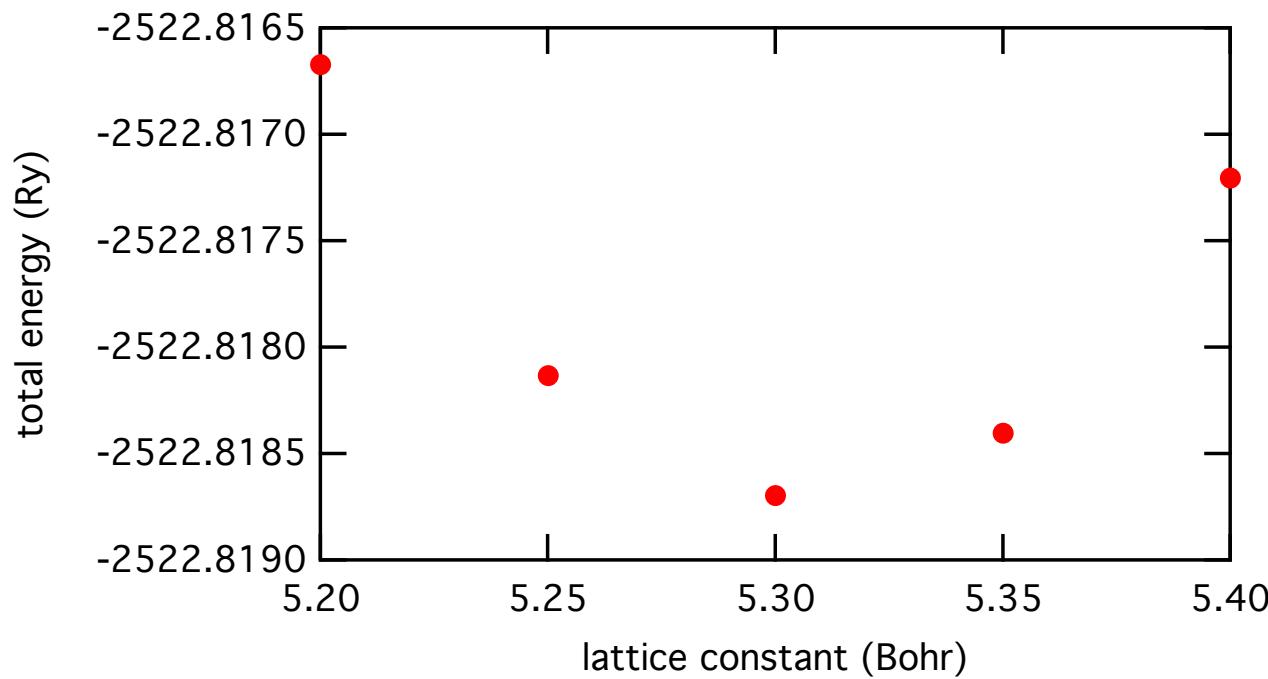
# Input file

```
c-----Fe-----  
c      go    data/fe  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a     b/a   alpha   beta   gamma  
  bcc      5.27  ,   ,   ,   ,   ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001   1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp  h  
c  update  
c-----  
c  nc>  
  1  
c-----  
c  type   ncmp   rmt   field   mixt   anclr   conc  
  Fe     1       0       0.0    2  
  26     -100  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx  
  0       0       0       type  
                           Fe  
c-----
```

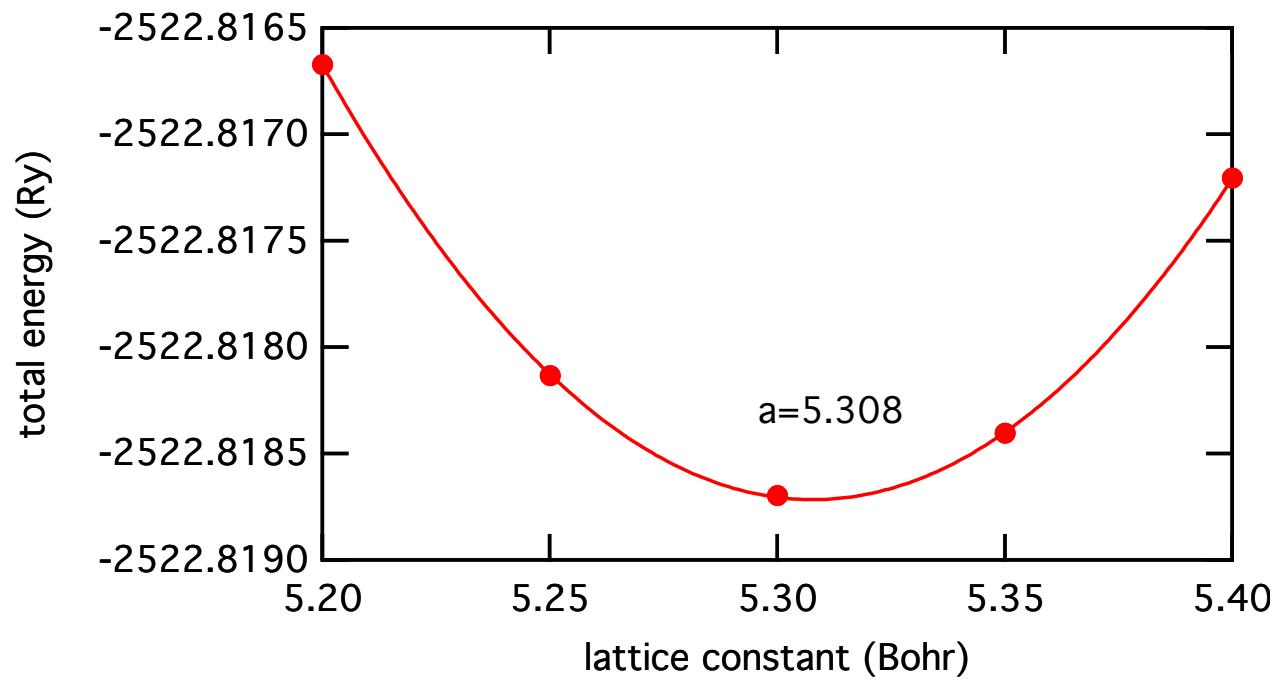
この2つの間に対応が  
とれていなければならぬ

その位置を占めるタイプ

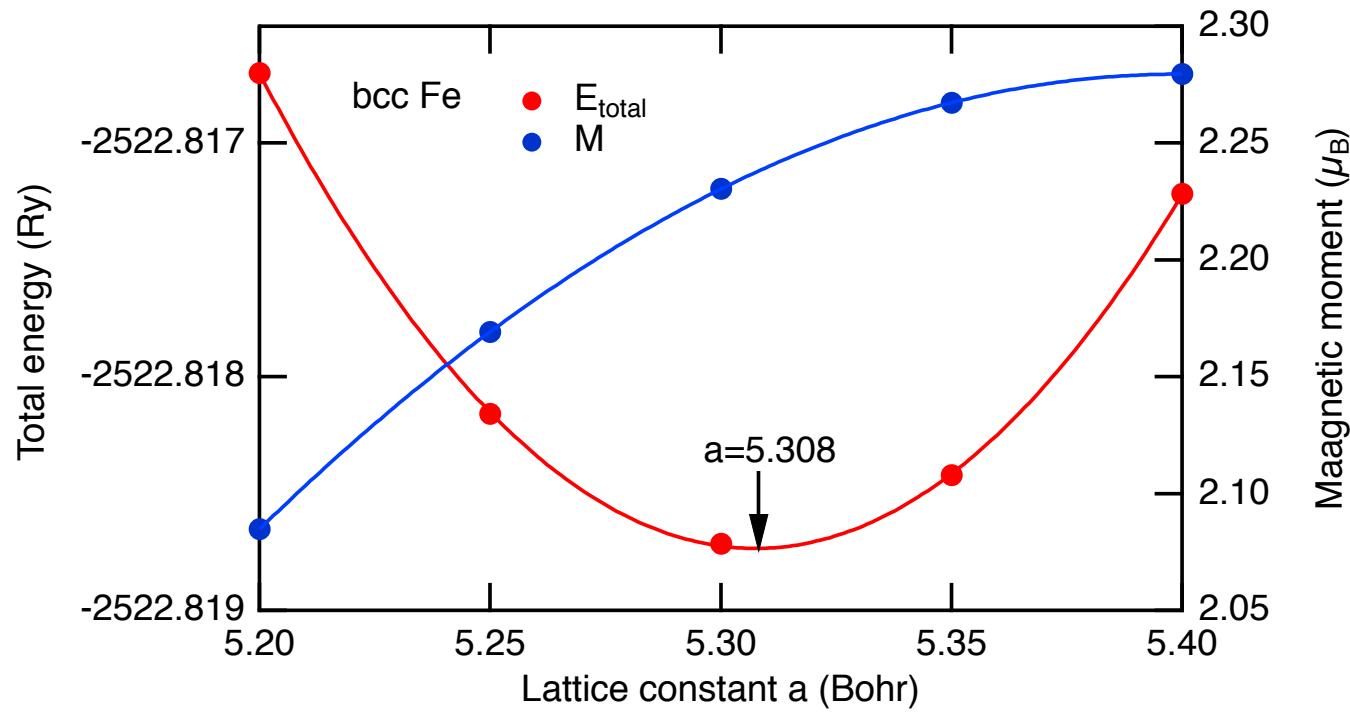
# 平衡格子定数(ゼロ圧力下での格子定数)の計算



# 平衡格子定数(ゼロ圧力下での格子定数)の計算



# 平衡格子定数(ゼロ圧力下での格子定数)の計算



# Input file for DOS

## DOSを描く

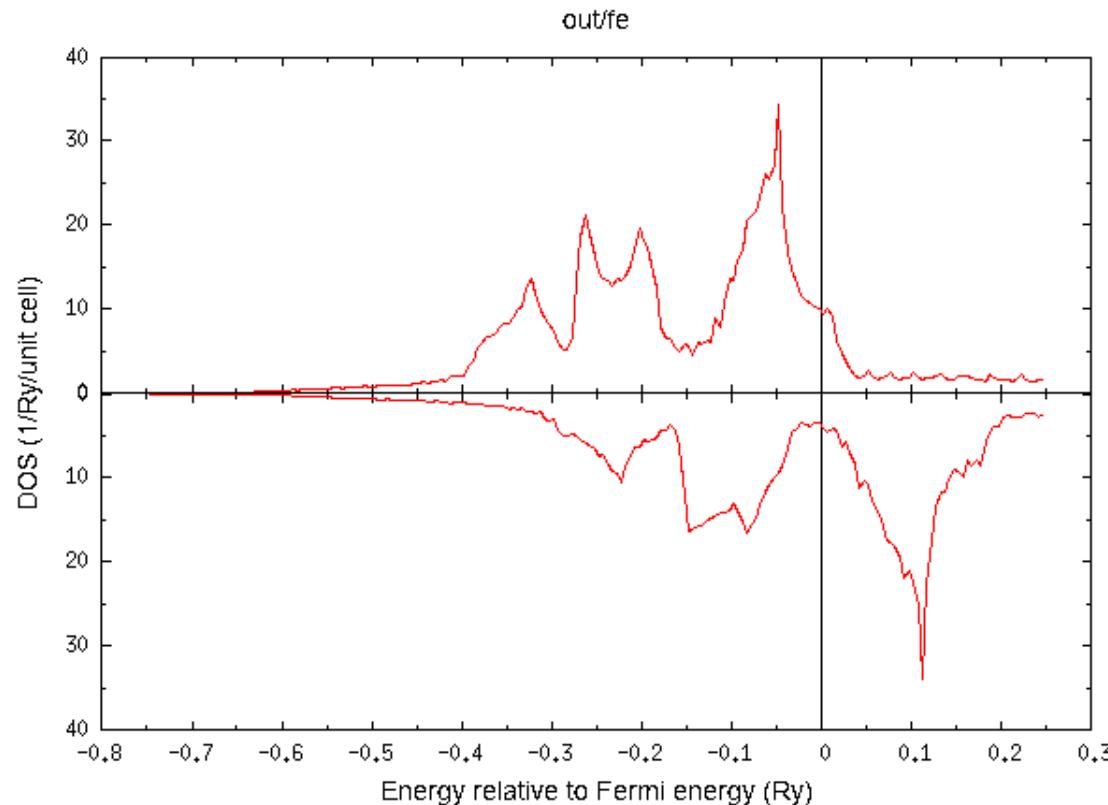
```
c-----Fe-----  
c dos data/fe  
c  
c br a beta gamma  
b , , ,  
c  
c edelt ewidth reltyp sdftyp magtyp record  
0.001 1.0 nrl mjh mag 2nd  
c  
c outtyp bzqlty maxitr pmix  
update 10 50 0.023  
c  
c ntyp 4 → 10~20:  
1  
c-----  
c type ncmp rmt field mxl anclr conc  
Fe 1 1 0.0 2 26 100  
c  
c natm 1  
c-----  
c atmicx 0 0  
c-----
```

大きめにとった方が  
DOSがスムーズになつて見た目が良い

# 状態密度(total DOS)

```
> gpd out/fe
```

gnuplotを呼び出して描画している  
Fe DOS



# Input file for dispersion curve

## エネルギー分散曲線を描く

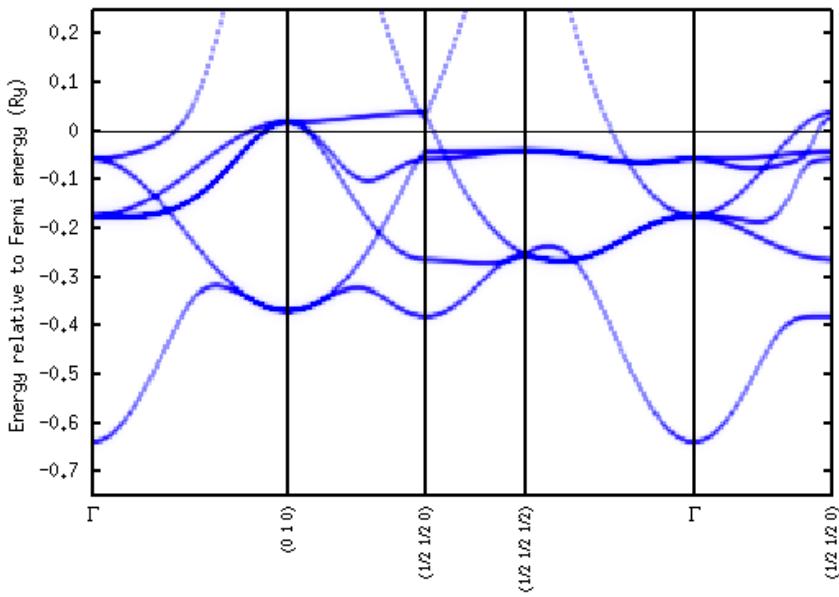
```
c-----Fe-----  
c      spc    data/fe  
c-----  
c      go → spc  
c      brg, c/a b/a alpha beta gamma  
c      bcc   5.27 , , , , , ,  
c-----  
c      edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
c      0.001   1.0       nrl       mjw       mag       2nd  
c-----  
c      outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
c      update     4        50      0.023  
c-----  
c      ntyp  
c      1  
c-----  
c      type     ncmp     rmt     field     mxl   anclr   conc  
c      Fe       1        1       0.0      2  
c                           26      100  
c-----  
c      natm  
c      1  
c-----  
c      atmicx          type  
c      0            0           Fe  
c-----
```

# エネルギー分散曲線

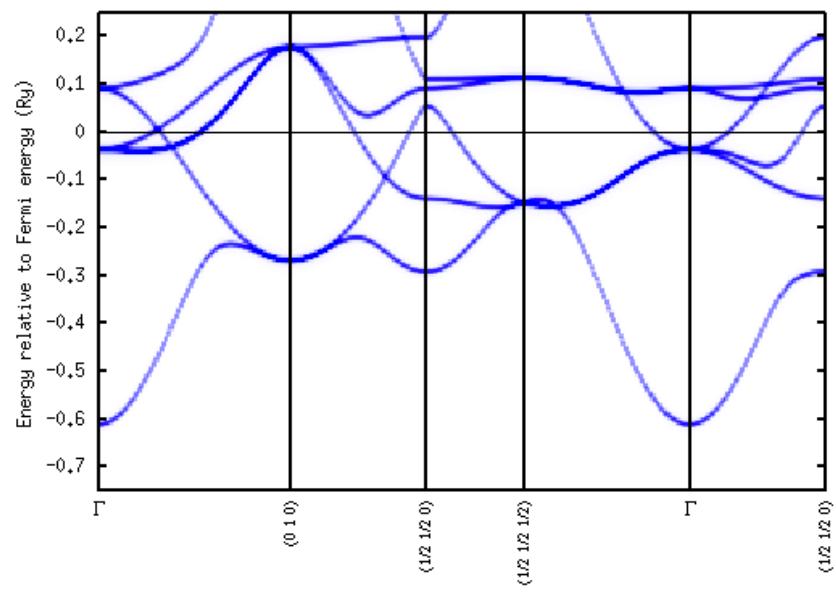
```
> spc data/fe_up.spc  
> spc data/fe_dn.spc
```

gunuplotを呼び出してイメージ描画している

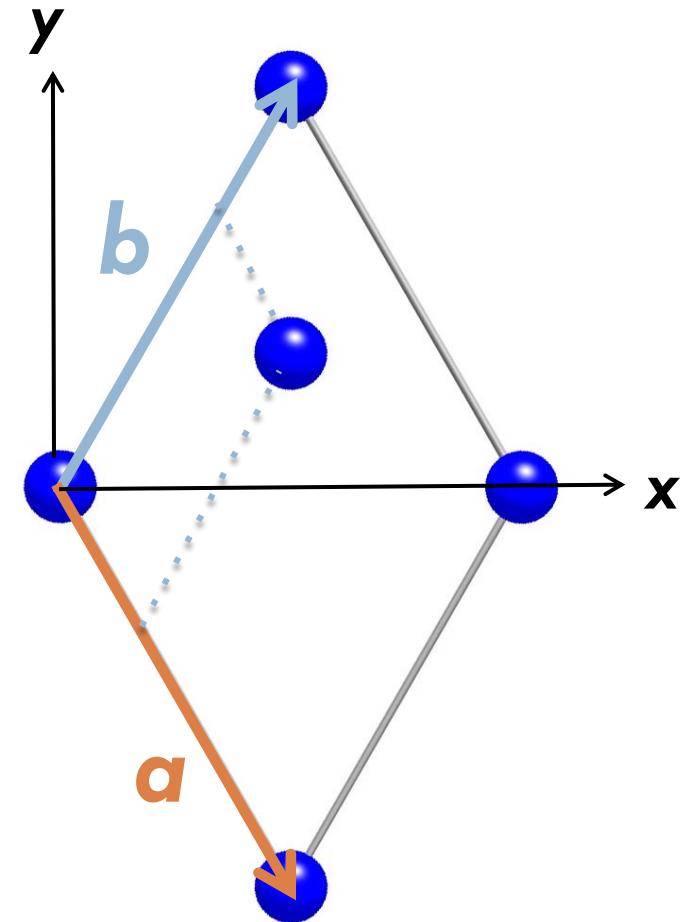
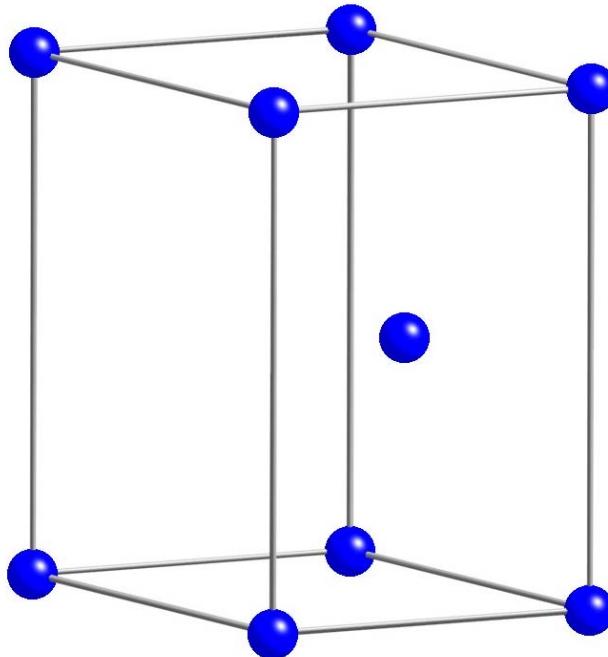
Fe spin-up



Fe spin-down



# hcp 構造



# Input file (Co)

```
c-----Co-----
c      go    data/co
c-----
c      brvtyp      a          c/a     b/a     alpha     beta     gamma
c          hcp        4.74 , 1.6215 , , , , ,
c-----
c      edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record
c          0.001      1.0       nrl       mjw       mag       2nd
c-----
c      outtyp      bzqlty     maxitr     pmix
c          update      4         50       0.023
c-----
c      ntyp
c          1
c-----
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr     conc
c          Co        1         1        0.0        2
c                                27        100
c-----
c      natm
c          2
c-----
c      atmicx                      type
c          0            0            0        Co
c          0.5        0.86602    0.81075  Co
c-----
```

# Input file (Co)

```
c-----Co-----  
c      go    data/co  
c-----  
c  brvtyp      a      c/a    b/a    alpha    beta   gamma  
  hcp        4.74 , 1.6215 , , , , ,  
c-----  
c  edelt      ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001     1.0       nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp     bzqlty   maxitr   pmix  
  update      4         50       0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp      rn  
  Co        1  
c-----  
c  natm  
  2  
c-----  
c  atmicx  
  0          0          0          type  
  0.5        0.86602   0.81075  Co  
c-----
```

a を単位とした原子位置  
のカーテシアン座標

# Input file (Co)

```
c-----Co-----  
c      go    data/co  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  hcp      4.74 , 1.6215 , , , , ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001    1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update    4        50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp   rn  
  Co      1  
c-----  
c  natm  
  2  
c-----  
c  atmidx  
  0      0      0      type  
  1/2    0.86602  0.81075  Co  
c-----
```

分数も使える

# Input file (Co)

```
c-----Co-----  
c      go    data/co  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  hcp      4.74 , 1.6215 , , , , ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001    1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update    4        50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type    ncmp   r  
  Co      1  
c-----  
c  natm  
  2  
c-----  
c  atmicx  
  0x      0y      0z      type  
  1/2x    0.86602y 1/2z    Co  
c-----
```

単位格子ベクトル  $a$ ,  $b$ ,  $c$   
を用いて位置を指定する  
こともできる

# Input file (Co)

```
c-----Co-----  
c      go    data/co  
c-----  
c  brvtyp   a       c/a   b/a   alpha   beta   gamma  
  hcp      4.74 , 1.6215 , , , , ,  
c-----  
c  edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record  
  0.001    1.0      nrl      mjw      mag      2nd  
c-----  
c  outtyp   bzqlty   maxitr   pmix  
  update    4        50       0.023  
c-----  
c  ntyp    1  
c-----  
c  type    Co  
c-----  
c  natm    2  
c-----  
c  atmicx  
  0x      0y      0z      type  
  1/2x    0.86602y  1/2z    Co  
  1/2x    0.86602y  1/2z    Co  
c-----
```

このように書くと x, y, z 軸方向に取った直方体の稜ベクトルで原子位置を指定したことになる

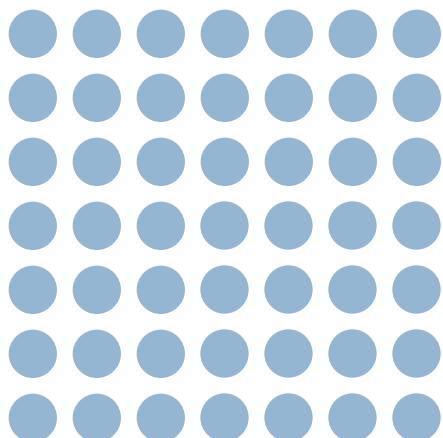
# 不純物問題

- 母体のグリーン関数

$$\tilde{G} = g_0 [1 - t_{\text{host}} g_0]^{-1}$$

- 母体原子の一つが不純物原子に置き換わったときの散乱を考える

$$G = \tilde{G} [1 - (t_{\text{impurity}} - t_{\text{host}}) \tilde{G}]^{-1}$$



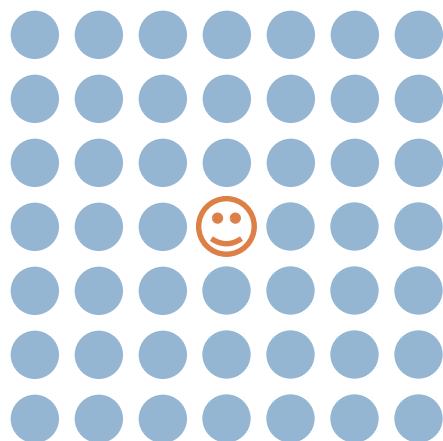
# 不純物問題

- 母体のグリーン関数

$$\tilde{G} = g_0 [1 - t_{\text{host}} g_0]^{-1}$$

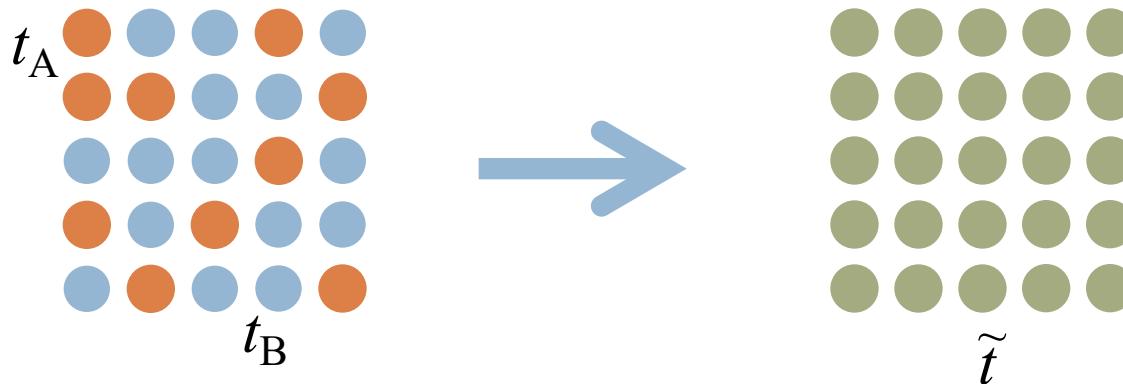
- 母体原子の一つが不純物原子に置き換わったときの散乱を考える

$$G = \tilde{G} [1 - (t_{\text{impurity}} - t_{\text{host}}) \tilde{G}]^{-1}$$



# CPA (コヒーレント・ポテンシャル近似)

- 置換型不規則合金のマクロな物性は原子に関する配置平均をとった結果として表される。このような配置平均をとったあとの状態を再現する仮想原子に対応した  $\dagger$  行列 (コヒーレント  $\dagger$  行列) を考える。



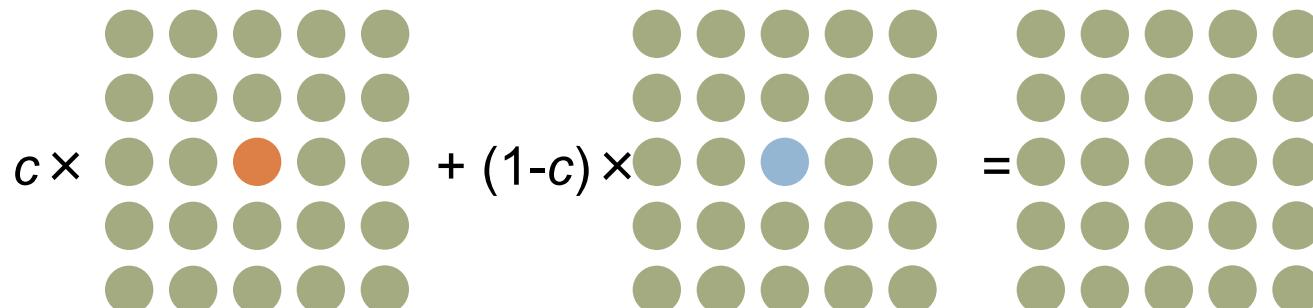
# CPA

- コヒーレント † 行列は次の関係を満たす.

$$\tilde{G} = g_0 [1 - \tilde{t} g_0]^{-1}$$

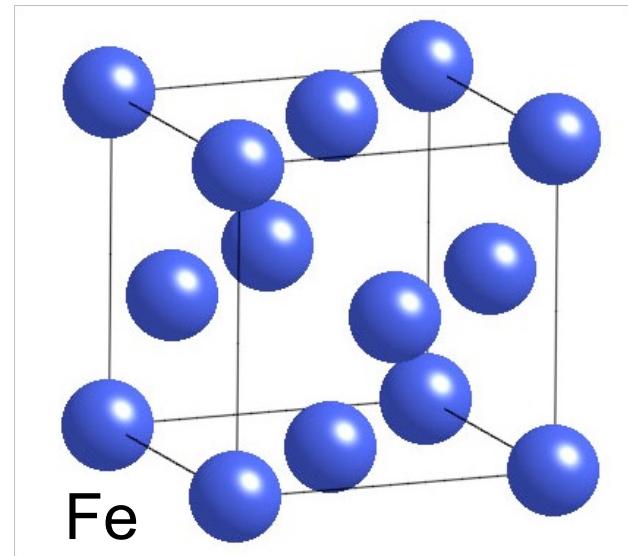
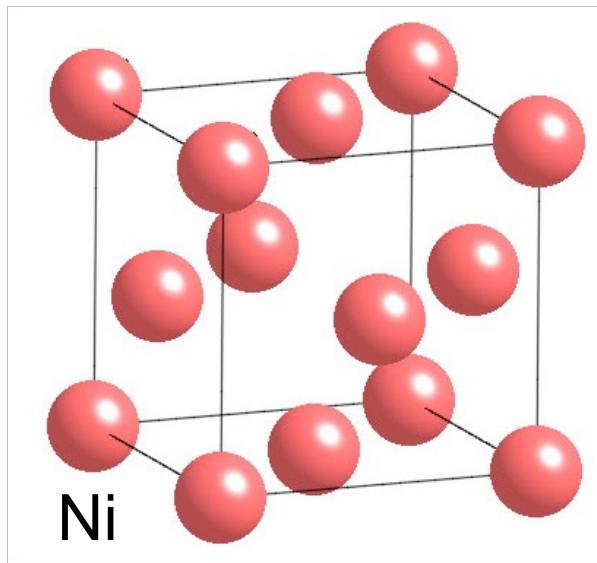
$$G^{A(B)} = \tilde{G} [1 - (t_{A(B)} - \tilde{t}) \tilde{G}]^{-1}$$

$$cG^A + (1-c)G^B = \tilde{G}$$



# NiFe 合金 (fcc)

- Ni 原子を Fe 原子で置き換えていく



# Input file

```
c-----NiFe-----
c      go    data/nife
c-----  
c      brvtyp      a          c/a     b/a     alpha     beta     gamma
c      fcc        6.55 ,       ,       ,       ,       ,       ,
c-----  
c      edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record
c      0.001      1.0        nrl        mjw        mag        2nd
c-----  
c      outtyp     bzqlty     maxitr     pmix
c      update      4          50        0.023
c-----  
c      ntyp
c      1
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc
c      NiFe      2          1        0.0      2
  
c-----  
c      natm
c      1
c-----  
c      atmicx           type
c      0                 0           NiFe
c-----
```

# Input file

```
c-----NiFe-----
c      go    data/nife
c-----  
c      brvtyp      a          c/a     b/a     alpha     beta     gamma
c      fcc        6.55 ,       ,       ,       ,       ,       ,
c-----  
c      edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record
c      0.001      1.0        nrl        mjw        mag        2nd
c-----  
c      outtyp     bzqlty     maxitr     pmix
c      update      4          50        0.023
c-----  
c      ntyp
c      1
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc
c      NiFe      2          1          0.0      2          26          80
c-----  
c      natm
c      1
c-----  
c      atmicx           type
c      0            0            0            NiFe
c-----
```

このタイプの位置を  
占める原子の種類は2個

# Input file

```
c-----NiFe-----
c      go    data/nife
c-----  
c      brvtyp      a          c/a      b/a      alpha      beta      gamma
c      fcc        6.55 ,       ,       ,       ,       ,       ,
c-----  
c      edelt      ewidth     reltyp     sdftyp     magtyp     record
c      0.001      1.0        nrl        mjw        mag        2nd
c-----  
c      outtyp     bzqlty     maxitr     pmix
c      update      4          50        0.023
c-----  
c      ntyp
c      1
c-----  
c      type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc
c      NiFe      2          1          0.0      2          26        80
c                                28        20
c-----  
c      natm
c      1
c-----
```

原子の種類は Fe 26, Ni 28,  
この位置を占める確率はそれぞれ80%, 20%

# Input file

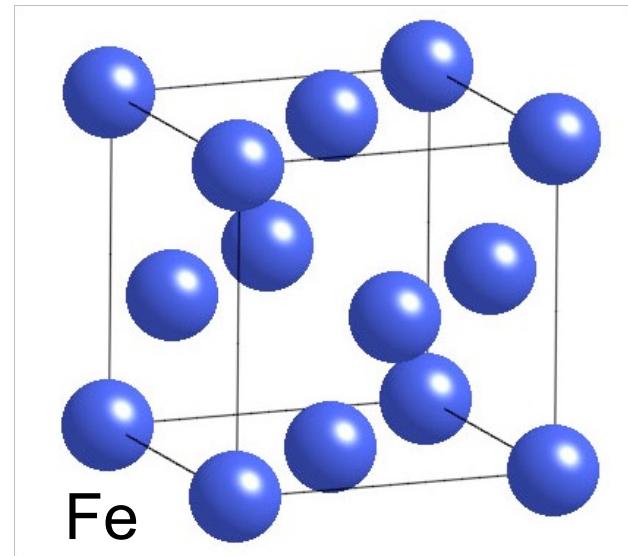
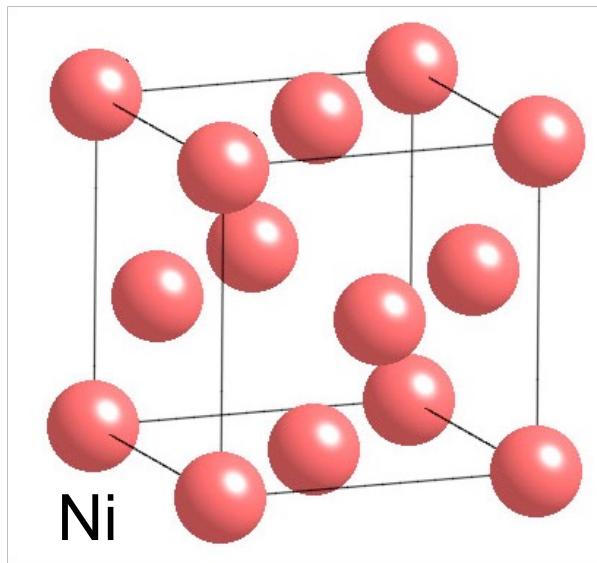
```
c-----NiFe-----
c      go    data/nife
c-----  
c      brvtyp   a       c/a     b/a     alpha    beta    gamma
c          fcc     6.55 , , , , , , ,
c-----  
c      edelt   ewidth   reltyp   sdftyp   magtyp   record
c          0.001   1.0     nrl      mjw      mag      2nd
c-----  
c      outtyp   h      update
c-----  
c      ncmp    1
c-----  
c      type    ncmp   rmt   field   mixt   anclr   conc
c      NiFe    2      1     0.0     2       26      80
c                  28      20
c-----  
c      natm    1
c-----  
c      atmicx
c          0      0      0      type
c          NiFe
c-----
```

この2つの間に対応が  
とれていなければならぬ

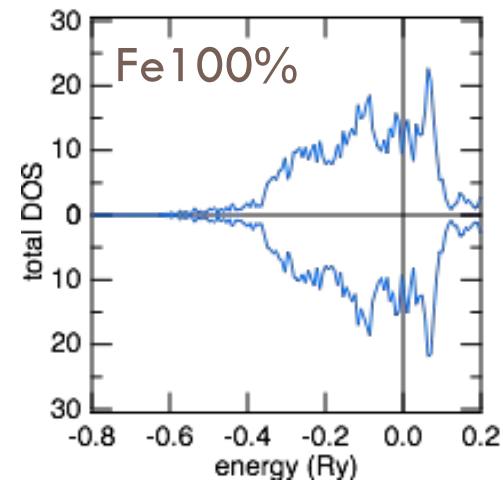
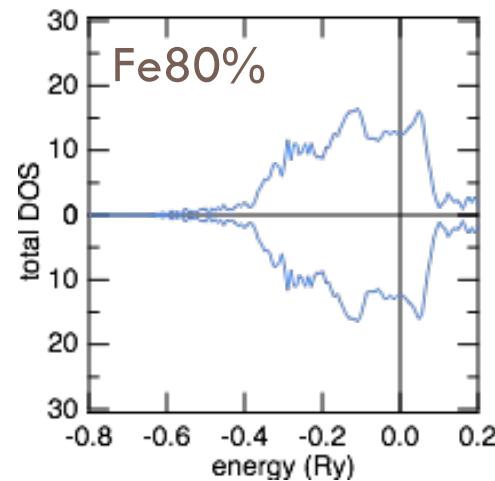
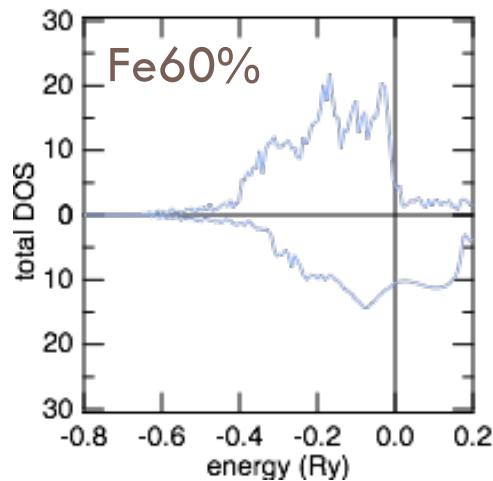
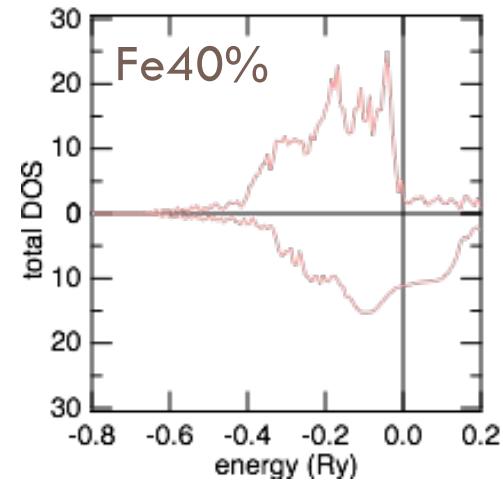
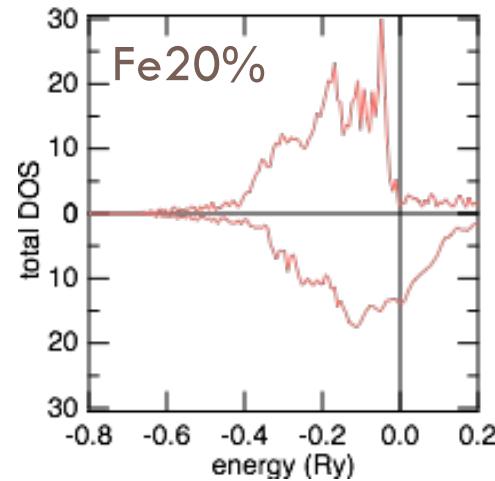
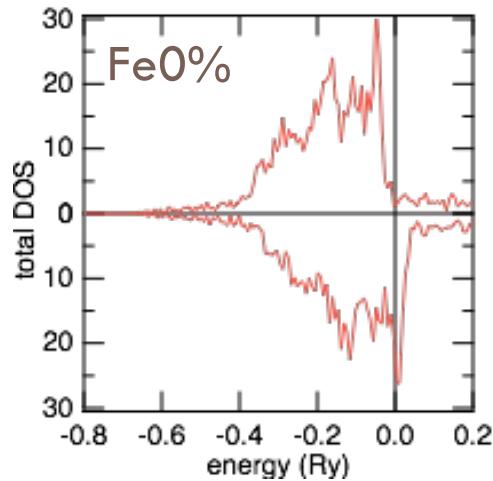


# NiFe 合金 (fcc)

- Ni 原子を Fe 原子で置き換えていく

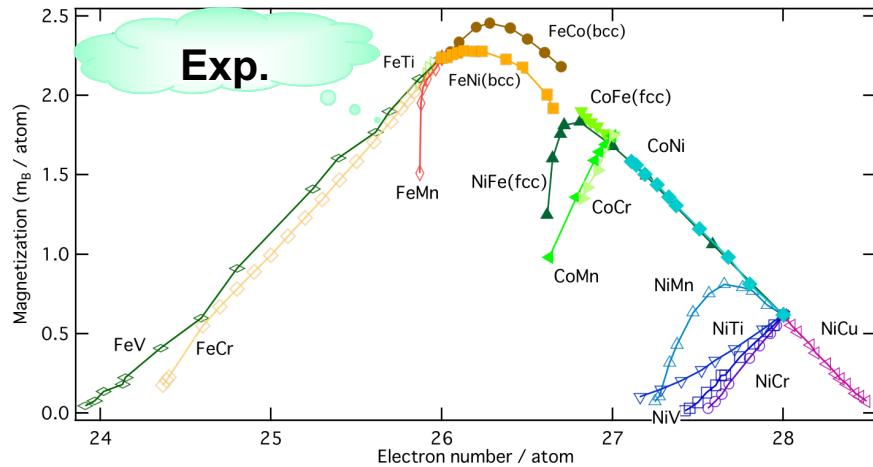
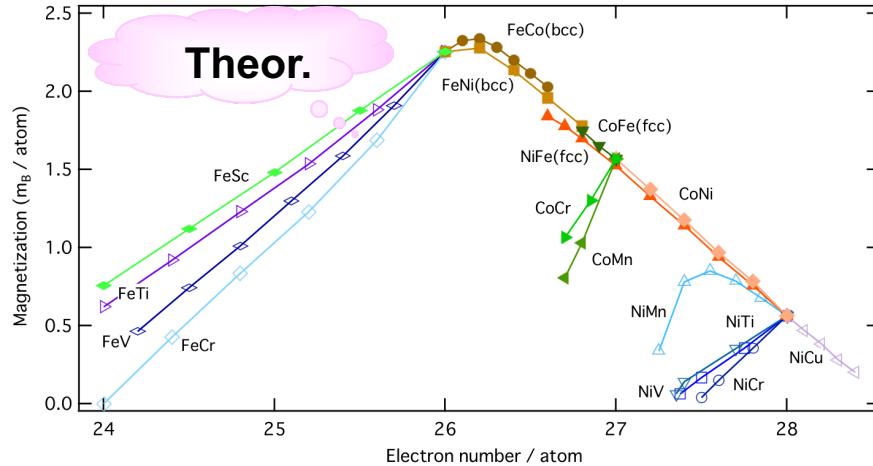


# NiFe 合金 (fcc)



# スレータ・ポーリング曲線

- Fe, Co, Niなどの遷移金属元素からなる合金
- 磁気モーメントは共通の曲線上にのる
- 計算は実験的にえられている結果を枝分かれの状況も含めて良く再現する。



H. Akai, Hyperfine Interactions 68 (1991) 3

H.P.J. Wijn, Magnetic Properties of Metals (1991)

# Input file for dispersion curve

```
c-----Inpurity inFe-----  
c      go    data/feX  
c-----  
c  brvtyp      a      c/a      b/a      alpha      beta      gamma  
  bcc      5.27 , , , , , ,  
c-----  
c  edelt      ewidth      reltyp      sdftyp      magtyp      record  
  0.001     1.0       nrl       mjw       mag      2nd  
c-----  
c  outtyp      bzqlty      maxitr      pmix  
  update      4          50      0.023  
c-----  
c  ntyp  
  1  
c-----  
c  type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc  
  FeX       2          1        0.0       2          26      100  
                           1          0  
c-----  
c  natm  
  1  
c-----  
c  atmicx  
  0          0          0          type  
                           FeX  
c-----
```

確率(濃度)はゼロ

# Fe中の遷移金属不純物

- 3d

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
21	22	23	24	25	26	27	28	29	30

- 4d

Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
39	40	41	42	43	44	45	46	47	48

- 5d

Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
71	72	73	74	75	76	77	78	79	80

- 局所磁気モーメント(磁化に対して平行か反平行か?)

# Fe中の遷移金属不純物

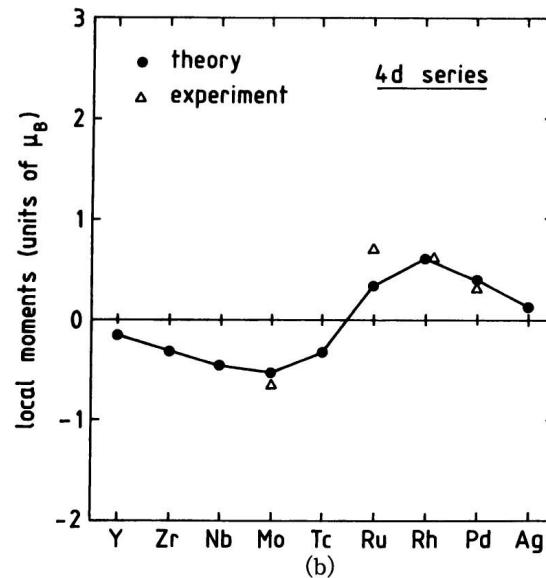
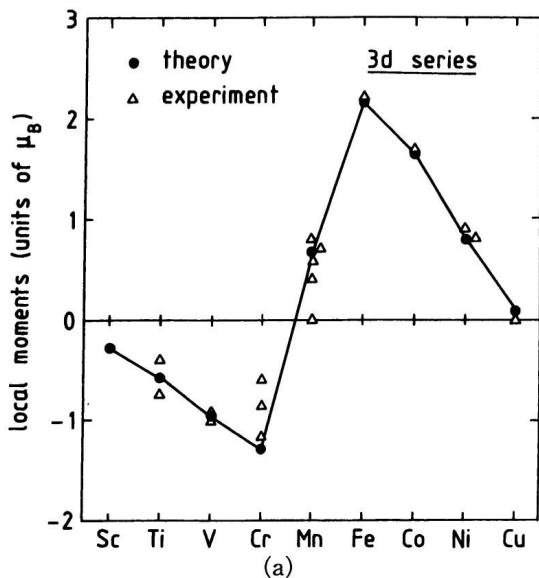


Fig. 2.14. Local moments of 3d impurities (a) and 4d impurities (b) in Fe. The triangles are experimental values from neutron scattering (see Ref. 110).

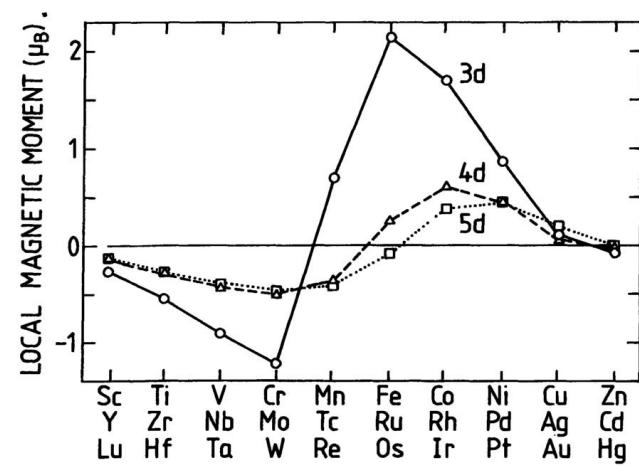


Fig. 2.15. Local moments of 5d impurities in Fe. For comparison also the results for 3d and 4d impurities are given.

# Fe中の遷移金属不純物

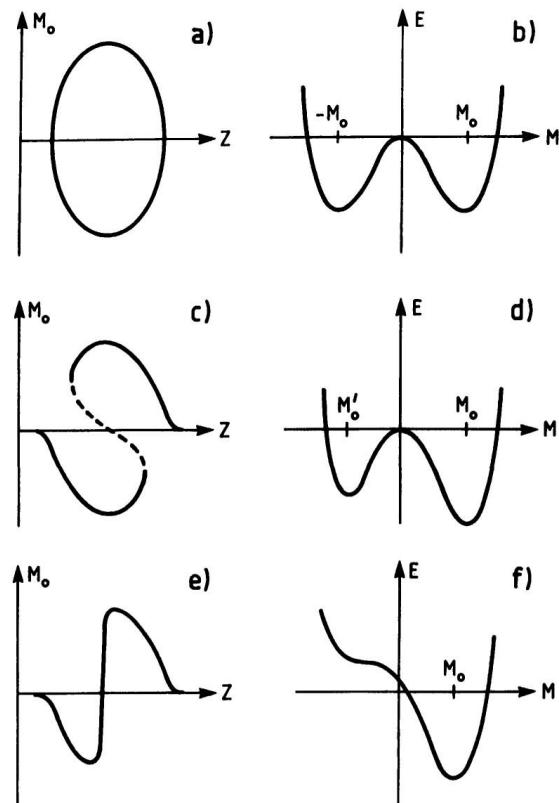
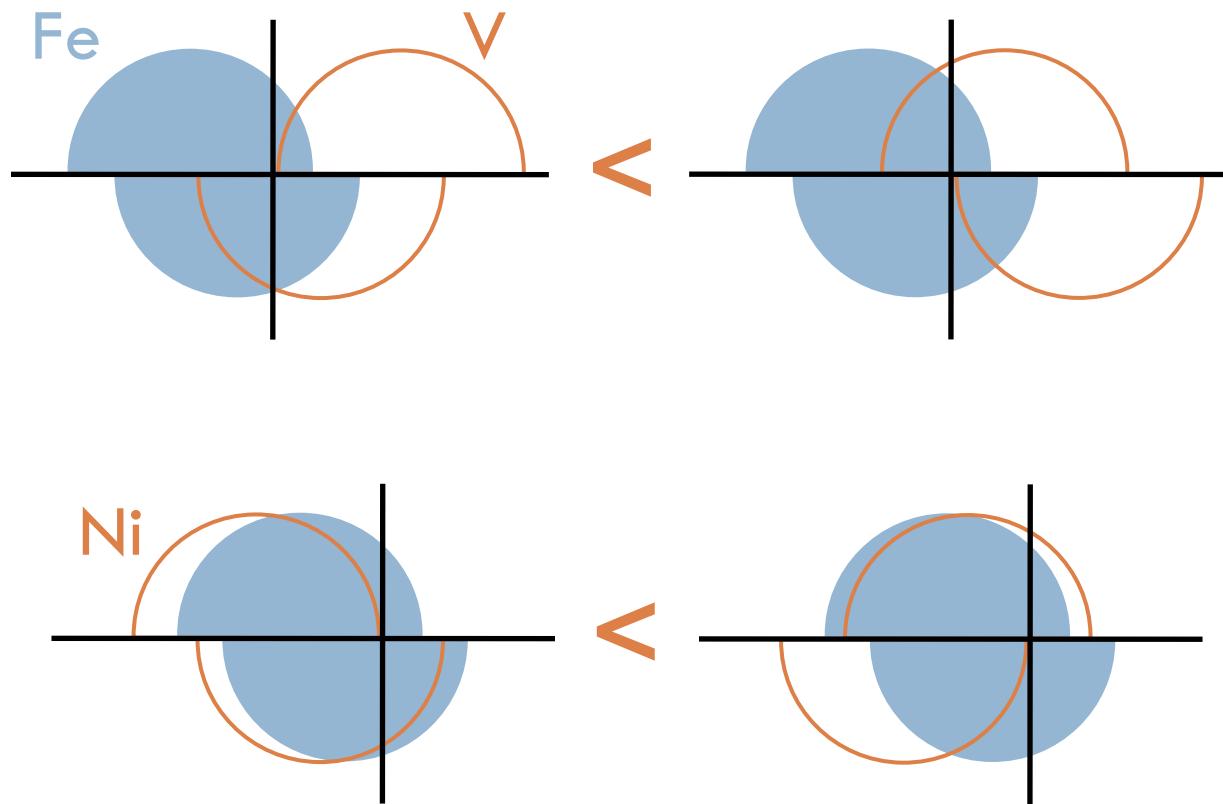
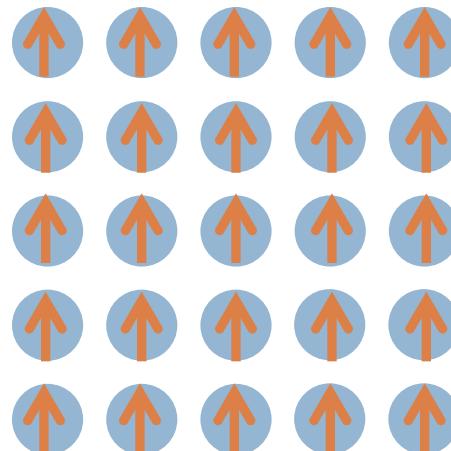


Fig. 2.13. Schematic behavior for the total energy  $E$  as a function of the variable impurity moment  $M_0$  as a function of the atomic number  $Z$ . (a) and (b) refer to  $3d$  impurities in a paramagnetic host like, e.g., Cu, (c) and (d) refer to a ferromagnet with a small host moment like Ni, and (e) and (f) refer to a ferromagnet with a larger moment like Fe.



# 強磁性転移温度(キュリー温度)

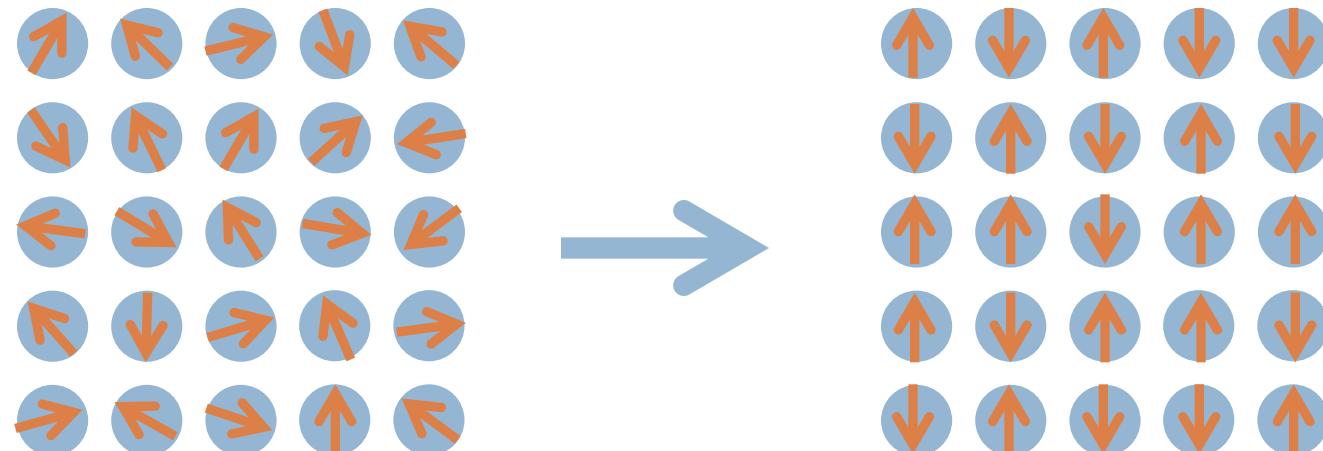
- 強磁性状態
  - 磁気モーメントは同じ向きを向いている



# 強磁性転移温度(キュリー温度)

## ■ 常磁性状態

- 局所磁気モーメントの方向はランダム
- 各原子の磁気モーメントは上向きか、下向きかのいずれからをランダムに向いている。
  - (不規則局所モーメント: local moment disorder LMD)



# キュリー温度

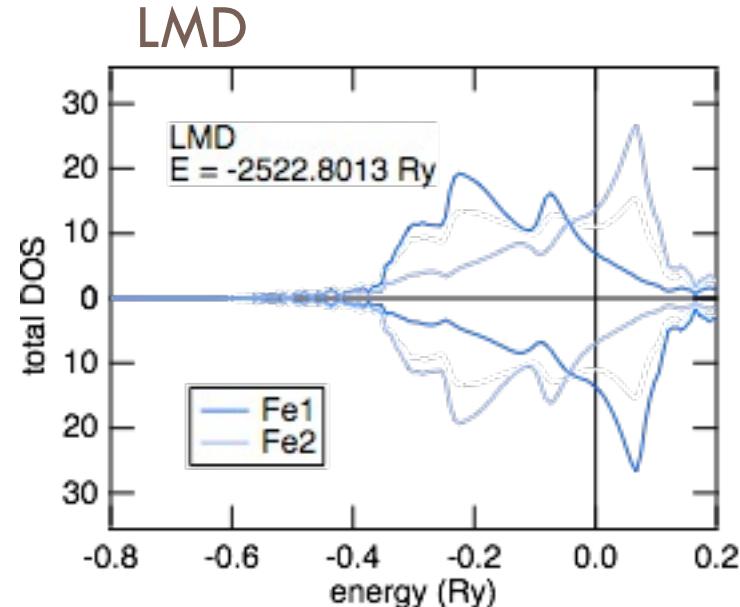
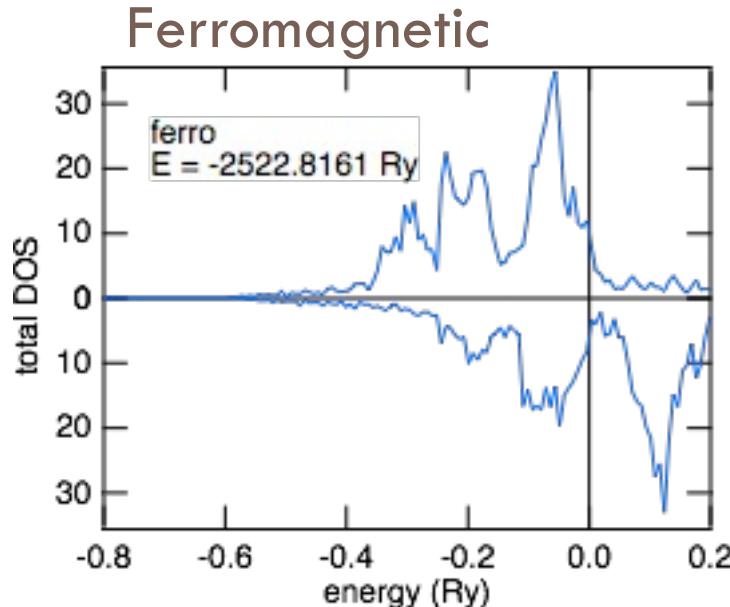
平均場近似では

$$T_C = \frac{2}{3} (E_{\text{LMD}} - E_{\text{Ferro}}) / k_B$$

$$1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ eV}, \quad k_B = 8.617 * 10^{-5} (\text{eV/K})$$

1 mRy はほぼ Tc=100 K に対応

# Feのキュリー温度



平均場近似

$$T_C = \frac{2}{3} (E_{\text{LMD}} - E_{\text{Ferro}}) / k_B$$

$$1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ eV}, \quad k_B = 8.617 * 10^{-5} (\text{eV/K})$$

実験値:  $\sim 1044 \text{ K}$

# 永久磁石材料 $\text{NdFe}_{12}\text{N}$

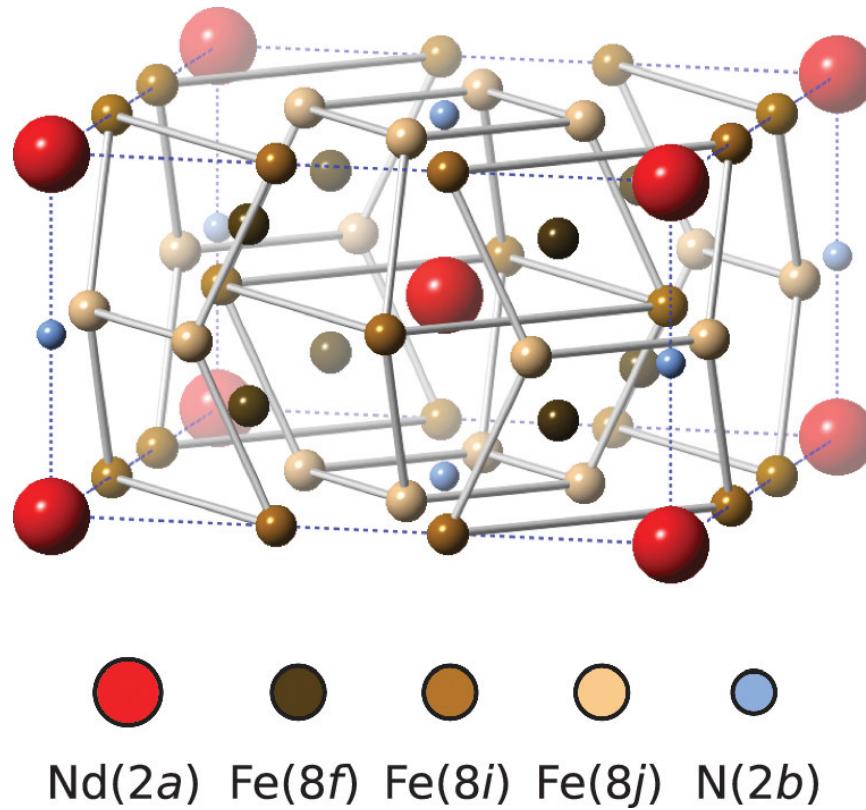


FIG. 1. Crystal structure of  $\text{NdFe}_{12}\text{N}$ . Along the  $\text{Nd}(2a)$ - $\text{N}(2b)$ - $\text{Nd}(2a)$  direction runs the  $c$ -axis. Perpendicular to it, the other two equivalent directions,  $a$ -axis and  $b$ -axis, span the  $\text{Nd}(2a)$ - $\text{Fe}(8i)$ - $\text{Fe}(8i)$ - $\text{Nd}(2a)$  lines.

Published in: Munehisa Matsumoto; Hisazumi Akai; Yosuke Harashima; Shotaro Doi; Takashi Miyake; *Journal of Applied Physics* **119**, 213901 (2016)  
DOI: 10.1063/1.4952989  
Copyright © 2016 Author(s)

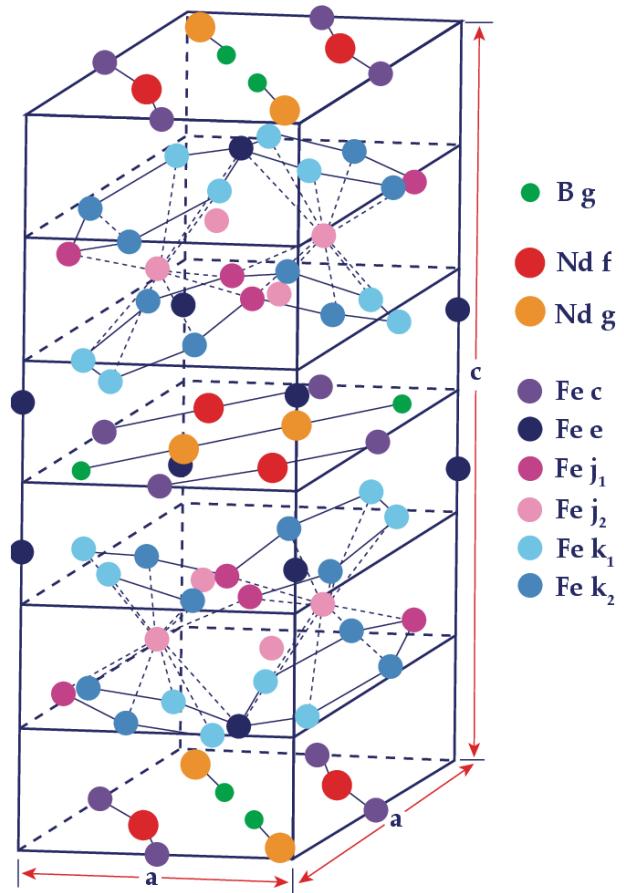
# Input File for NdFeN

```
c----- NdFe12N -----
go data/ndfe12n
bct 16.44 0.5567 , , , ,
0.001 1.60 sra mjwasa mag 2nd
update 2 500 0.02

5
Fe_8j 1 1.00 0.00 2 26 100
Fe_8i 1 1.00 0.00 2 26 100
Fe_8f 1 1.00 0.00 2 26 100
Nd_2a 1 1.00 0.00 3 60 100
N_2b 1 1.00 0.00 2 7 100

14
0.2760x 1/2y 0z Fe_8j
-0.2760x 1/2y 0z Fe_8j
1/2x 0.2760y 0z Fe_8j
1/2x -0.2760y 0z Fe_8j
0.3620x 0y 0z Fe_8i
-0.3620x 0y 0z Fe_8i
0x 0.3620y 0z Fe_8i
0x -0.3620y 0z Fe_8i
1/4x 1/4y 1/4z Fe_8f
3/4x 3/4y 1/4z Fe_8f
3/4x 1/4y 1/4z Fe_8f
1/4x 3/4y 1/4z Fe_8f
0x 0y 0z Nd_2a
0x 0y 1/2z N_2b
```

# 最強の永久磁石材料 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$



ユニットセルあたり68原子

J. Herbst, et. al, Phys. Rev. B29, 4176(R) (1984).

# Input File for NdFeB

```
c----- Nd2Fe14B -----
go  data/nd2fe14b_demo
st 16.64 1.385, , , , ,
0.001  0.92  nrl mjwasa kick10 2nd
update  0  100 .023

12
B_g    1  0.00 0.00  2   5 100
Fe_ca  1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_cb  1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_e   1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_j1  1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_j2  1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_k1a 1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_k1b 1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_k2a 1  0.00 0.00  2  26 100
Fe_k2b 1  0.00 0.00  2  26 100
Nd_f   1  0.00 0.00  3  60 100
Nd_g   1  0.00 0.00  3  60 100
```

# Input File for NdFeB

68

0.375700a	0.624300b	0.500000c	B_g
0.624300a	0.375700b	0.500000c	B_g
0.875700a	0.875700b	0.000000c	B_g
0.124300a	0.124300b	0.000000c	B_g
0.000000a	0.500000b	0.500000c	Fe_ca
0.000000a	0.500000b	0.000000c	Fe_ca
0.500000a	0.000000b	0.500000c	Fe_cb
0.500000a	0.000000b	0.000000c	Fe_cb
0.500000a	0.500000b	0.614400c	Fe_e
0.000000a	0.000000b	0.114400c	Fe_e
0.000000a	0.000000b	0.885600c	Fe_e
0.500000a	0.500000b	0.385600c	Fe_e
0.097900a	0.097900b	0.704900c	Fe_j1
0.902100a	0.902100b	0.704900c	Fe_j1
0.402100a	0.597900b	0.204900c	Fe_j1
0.597900a	0.402100b	0.204900c	Fe_j1
0.402100a	0.597900b	0.795100c	Fe_j1
0.597900a	0.402100b	0.795100c	Fe_j1
0.097900a	0.097900b	0.295100c	Fe_j1
0.902100a	0.902100b	0.295100c	Fe_j1
0.317400a	0.317400b	0.746500c	Fe_j2
0.682600a	0.682600b	0.746500c	Fe_j2
0.182600a	0.817400b	0.246500c	Fe_j2
0.817400a	0.182600b	0.246500c	Fe_j2
0.182600a	0.817400b	0.753500c	Fe_j2
0.817400a	0.182600b	0.753500c	Fe_j2
0.317400a	0.317400b	0.253500c	Fe_j2
0.682600a	0.682600b	0.253500c	Fe_j2

# Input File for NdFeB

0.223500a	0.567100b	0.626900c	Fe_k1a
0.776500a	0.432900b	0.626900c	Fe_k1a
0.932900a	0.723500b	0.126900c	Fe_k1a
0.067100a	0.276500b	0.126900c	Fe_k1a
0.276500a	0.067100b	0.873100c	Fe_k1b
0.723500a	0.932900b	0.873100c	Fe_k1b
0.567100a	0.223500b	0.373100c	Fe_k1b
0.432900a	0.776500b	0.626900c	Fe_k1b
0.776500a	0.432900b	0.373100c	Fe_k1a
0.223500a	0.567100b	0.373100c	Fe_k1a
0.067100a	0.276500b	0.873100c	Fe_k1a
0.932900a	0.723500b	0.873100c	Fe_k1a
0.723500a	0.932900b	0.126900c	Fe_k1b
0.276500a	0.067100b	0.126900c	Fe_k1b
0.432900a	0.776500b	0.373100c	Fe_k1b
0.567100a	0.223500b	0.626900c	Fe_k1b
0.037900a	0.358700b	0.676300c	Fe_k2a
0.962100a	0.641300b	0.676300c	Fe_k2a
0.141300a	0.537900b	0.176300c	Fe_k2a
0.858700a	0.462100b	0.176300c	Fe_k2a
0.462100a	0.858700b	0.823700c	Fe_k2b
0.537900a	0.141300b	0.823700c	Fe_k2b
0.358700a	0.037900b	0.323700c	Fe_k2b
0.641300a	0.962100b	0.676300c	Fe_k2b
0.962100a	0.641300b	0.323700c	Fe_k2a
0.037900a	0.358700b	0.323700c	Fe_k2a
0.858700a	0.462100b	0.823700c	Fe_k2a

# Input File for NdFeB

0.141300a	0.537900b	0.823700c	Fe_k2a
0.537900a	0.141300b	0.176300c	Fe_k2b
0.462100a	0.858700b	0.176300c	Fe_k2b
0.641300a	0.962100b	0.323700c	Fe_k2b
0.358700a	0.037900b	0.676300c	Fe_k2b
0.268700a	0.268700b	0.500000c	Nd_f
0.731300a	0.731300b	0.500000c	Nd_f
0.231300a	0.768700b	0.000000c	Nd_f
0.768700a	0.231300b	0.000000c	Nd_f
0.141500a	0.858500b	0.500000c	Nd_g
0.858500a	0.141500b	0.500000c	Nd_g
0.641500a	0.641500b	0.000000c	Nd_g
0.358500a	0.358500b	0.000000c	Nd_g

# 参考文献

## ■ Reference

- 計算機ナノマテリアルデザイン入門(笠井秀明・赤井久純・吉田博編 大阪大学出版会)
  - W.Kohn and N. Rostoker, Phys. Rev. 94 (1954) 1111.
  - F.S. Ham and B. Segall, Phys. Rev. 124 (1961) 1786.
  - H. Akai, J. Phys. Soc. Japan 51 (1982) 468.
  - H. Akai, J. Phys.: Cond. Matter 1 (1989) 8045.
- 
- KKR パッケージ <http://kkr.issp.u-tokyo.ac.jp/>