

# KKR グリーン関数法

## AKAIKKR

# 強磁性鉄の計算を試みる

```
> 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= 90.00

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 overlaid by input and  
record 2 will be replaced by new output.

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

1番目の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。

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 dmpc= 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
```

格子間隙に溜まった  
電子数とスピンモー  
メント

全エネルギー (Ry)

フェルミエネルギー  
での状態密度

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)

# 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  
スピンモーメント

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

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

sftime 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 x  
スレッド数

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

OSや用いられた  
マシンの情報

elapsed time 0.38 sec ( 9 threads)

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

```
#-----Fe-----
  go  data/fe
#-----
#  brvtyp  a
  bcc  5.2
#-----
#  edelt  ewidth  record
  0.001  1.0  nrl  mjw  mag  2nd
#-----
#  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
#-----
#  atmicx  type
  0  0  0  Fe
#-----
```

第1カラムが #  
の行もコメント行

```
go data/fe
bcc      5.27 ,      ,      ,      ,      ,
0.001    1.0      ,      nrl      ,      mjl      ,      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.

```
go data/fe bcc 5.27,,,,,,0.001 1.0 nr1 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

```
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 nr1 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

```
c-----Fe-----
c  go  data/fe
c-----
c  brvty
c  bcc
c-----
c  edelt
c  0.001  1.0  1.0  1.0  1.0  1.0  1.0  1.0
c-----
c  outtyp  bzqlty  maxitr  pmt
c  update  4  50
c-----
c  ntyp
c  1
c-----
c  type  ncmp  rmt  rmt  rmt  rmt  rmt  rmt
c  Fe  1  1  0.0  2  26  100
c-----
c  natm
c  1
c-----
c  atmicx  type
c  0  0  0  Fe
c-----
```

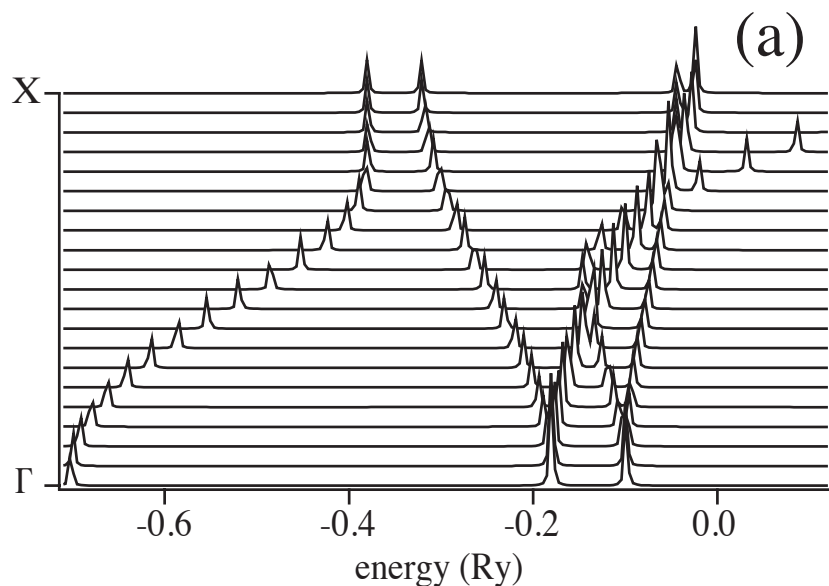
go : SCF計算の開始  
dos : 状態密度計算  
spc : エネルギー分散の計算

scf: self-consistent field  
dos: density of states  
spc: Bloch spectral function

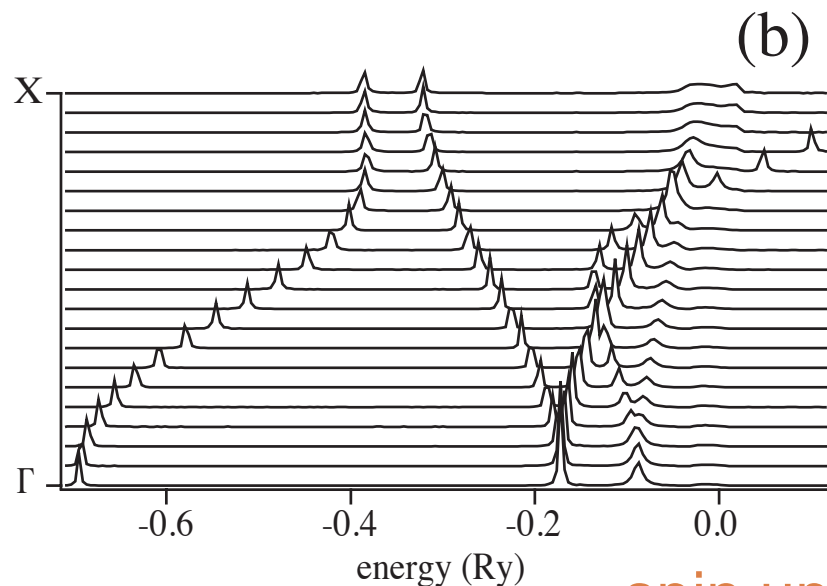
# ブロッホ・スペクトル関数

- 例えば, NiとNiMn合金のブロッホ・スペクトル関数

Ni



Ni<sub>0.85</sub>Mn<sub>0.15</sub>

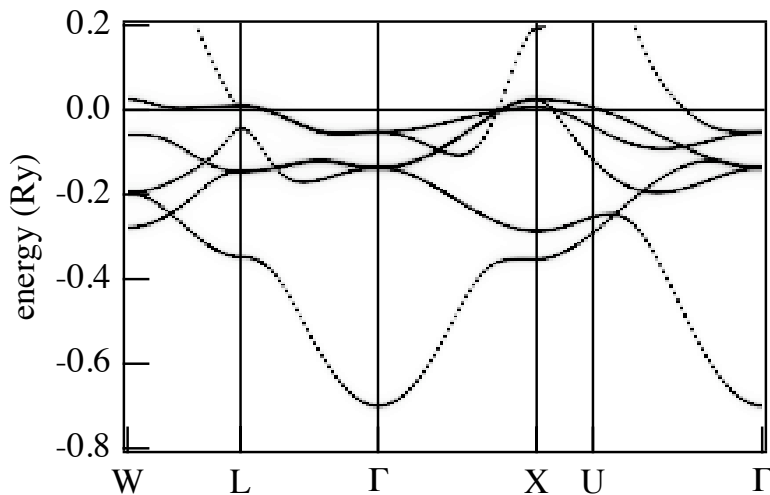
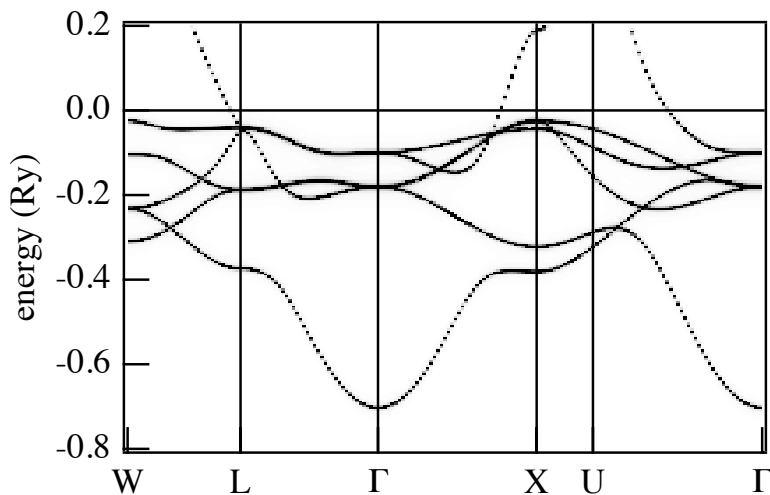


spin up

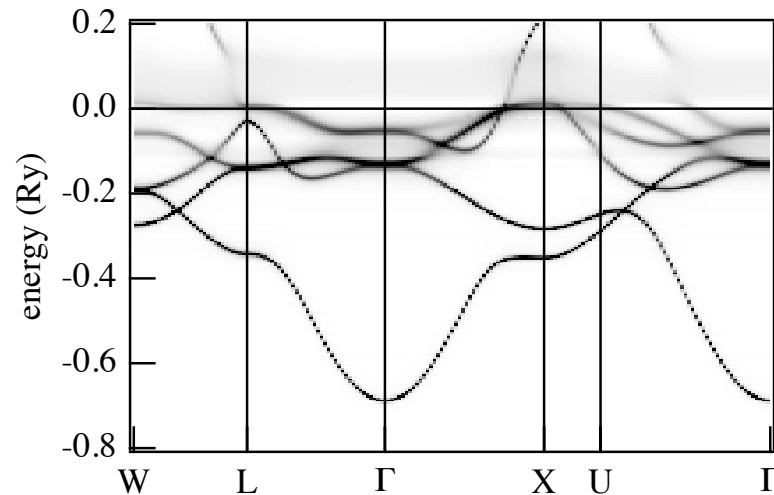
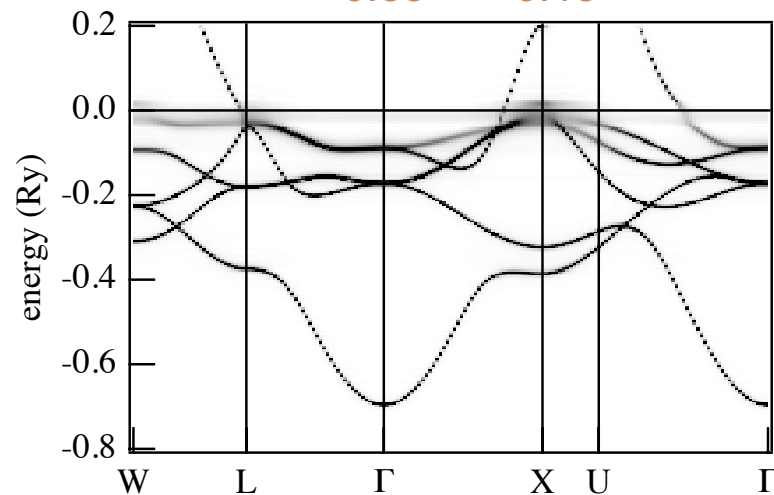


# ブロッホ・スペクトル関数

## ■ エネルギー分散 Ni



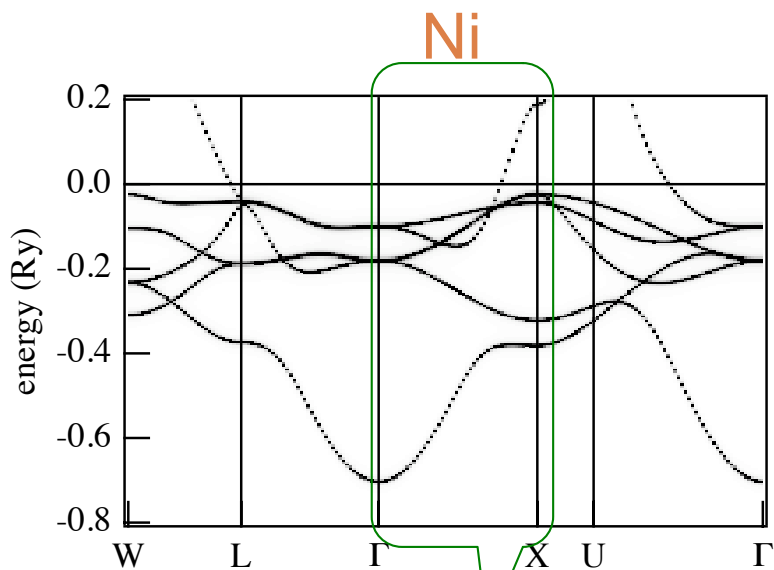
## Ni<sub>0.85</sub>Mn<sub>0.15</sub>



# ブロッホ・スペクトル関数

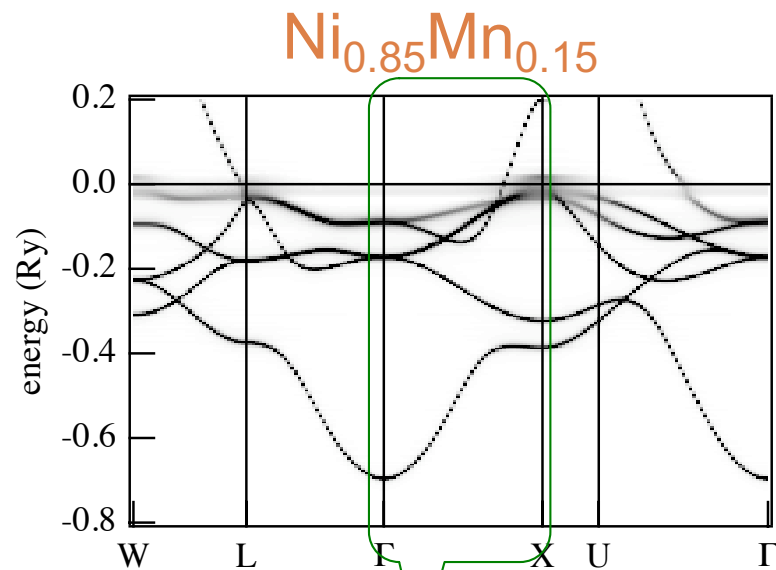
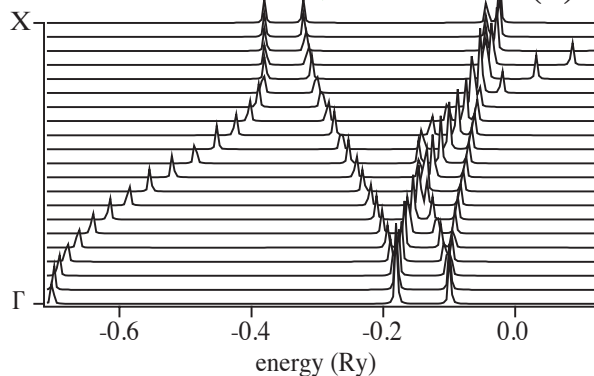
- エネルギー分散とブロッホ・スペクトル関数の対応

spin up



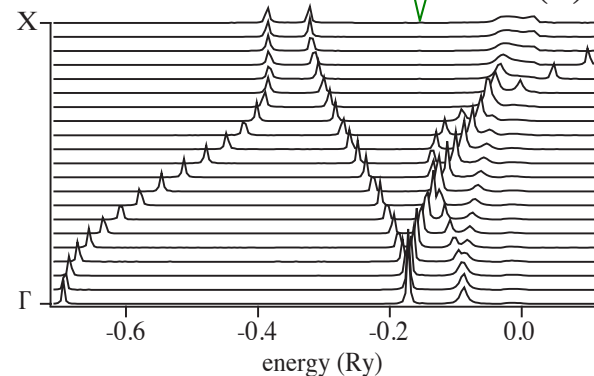
対応

(a)



対応

(b)



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  
C-----
```

Input file

```
c-----Fe  
c go data/fe  
c-----  
c brvtyp a c/a  
c bcc 5.27 , , , , , ,  
c-----  
c edel record  
0.001 fcc, bcc, hcp, sc, bct, st, etc 2nd  
c-----  
c outtyp  
update 4 50 0.025  
c-----  
c ntyp  
1  
c-----  
c fcc: face centered cubic 面心立方  
bcc: body centered cubic 体心立方  
hcp: hexagonal closed packed 六方稠密  
sc: simple cubic 単純立方  
bct: body centered tetragonal 体心正方  
st: simple tetragonal 単純正方  
などなど  
c-----  
c atmicx type  
0 0 0 Fe  
c-----
```

わからなければ空白でも良い。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 六方稠密  
sc: simple cubic 単純立方  
bct: body centered tetragonal 体心正方  
st: simple tetragonal 単純正方  
などなど

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

```
c-----Fe-----
  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           type
  0      0      0      Fe
c-----
```

スレータの原子単位

長さ : 1 bohr  $\approx$  0.529 Å

エネルギー : 1 Ry  $\approx$  13.6 eV

# Input file

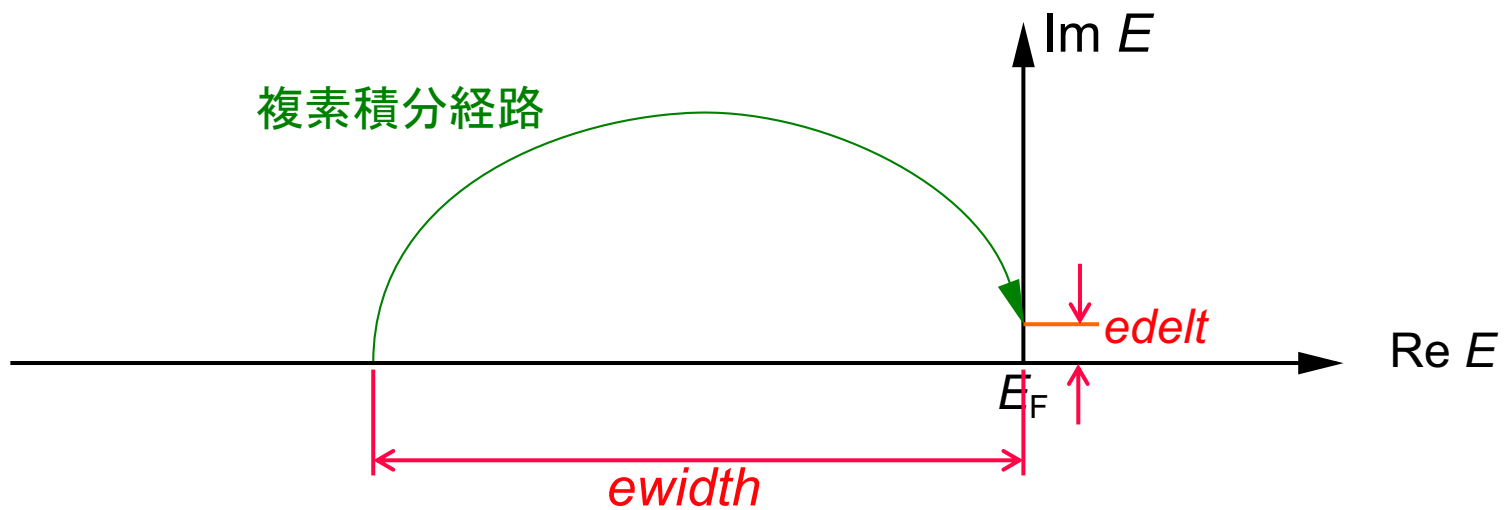
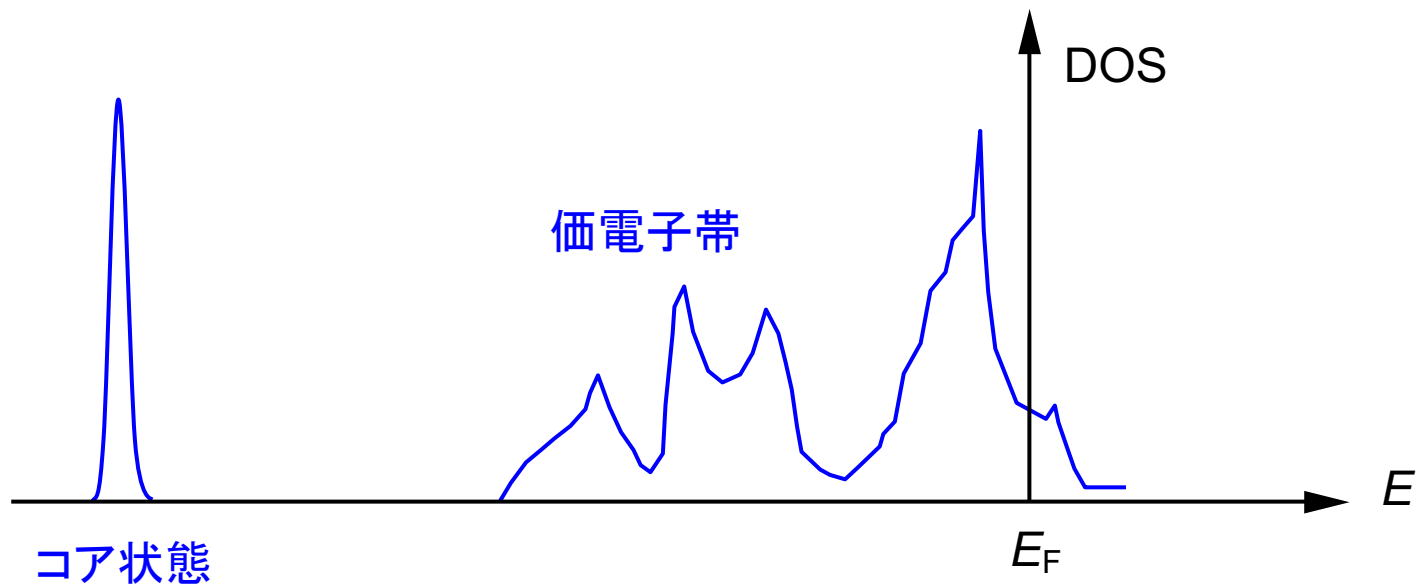
```
c-----Fe-----
  go  data/fe
c-----
c  brvtyp  a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  bcc      5.27  ,    ,    ,    ,    ,    ,
c-----
c  edelt   ewidth  relt   dftyp  magtyp  record
  0.001   1.0     njw   mag    2nd
c-----
c  outtyp
  update
c-----
c  ntyp
  1
c-----
c  type  ncmp  nmc  rctd  mxl  ancl  conc
  Fe    1    1    0.0  2    26   100
c-----
c  natm
  1
c-----
c  atmicx
  0      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

```
c-----Fe-----
  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     nr1     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
   0      0      0      Fe
c-----
```

edelt と ewidth ?





```
c-----Fe-----
  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  bzq7
  update  4
c-----
c  ntyp
  1
c-----
c  type    ncmp    rmt
  Fe      1      1
c-----
c  natm
  1
c-----
c  atmicx  0      0      0      type
  0      0      0      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

```
c-----Fe-----
  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    rnr
  Fe      1      1
                26    100
c-----
c  natm
  1
c-----
c  atmicx
  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

nrl: non relativistic  
sra: scalar relativistic

```
c-----Fe-----
      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    nr1     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
c-----
c  natm
c-----
c  a
c-----
```

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

mjw: Morruzi-Janak-Wiliams  
vbh: von Berth-Hedin  
vwn: Vosko-Wilk-Nusair  
gga91: generalized gradient approximation 91  
pbe: Perdew-Burke-Ernzerhof

```
c-----Fe-----
  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     nr1     mjw     mag     2nd
c-----
c  outtyp  bzqlty
  update  4
c-----
c  ntyp
  1
c-----
c  type    ncmp    rml
  Fe      1      1      0.0  2      100
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

```
c-----Fe-----
  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。



```
c-----Fe-----
  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).



```
c-----Fe-----
  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  0      0      0      type
           0      0      0      Fe
c-----
```

反復計算の最大反復数

```

c-----Fe-----
  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-----

```

チェ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 (最初チェビシェフそれからブロイデン)
- 0.023tch (チェビシェフだけ)
- 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.

```
c-----Fe-----
  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     Fe
c-----
```

異なったタイプの位置の数

結晶学的に  
同等でない位置

# Input file

```
c-----Fe-----
  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-----
```

タイプにつける任意の名前

# Input file

```
c-----Fe-----
  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-----
```

そのタイプの位置を  
占める原子の種類の数

```
c-----Fe-----  
c  go  data/fe  
c-----  
c  brvty
```

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  nclr  conc  
c  Fe    1    1    0.0  2    26    100
```

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

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

```
c-----Fe-----
  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      mju
c-----
c  outtyp  bzqlty  maxitr  pm
  update   4      50     0.02
c-----
c  ntyp
  1
c-----
c  type    ncmp    rmt     field  m      unclr  conc
  Fe       1      1      0.0    2      26     10
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

```

c-----Fe-----
  go  data/fe
c-----
c  brvtyp  a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  bcc      5.27  ,    ,    ,    ,    ,    ,
c-----
c  edelt   ewidth  reltyp  sdftyp  m
  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+行列がゼロでないとする最大の角運動量



# Input file

```
c-----Fe-----
  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-----
  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

```
c-----Fe-----
  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-----
  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
           0      0      0      Fe
c-----
```

原子の位置

# Input file

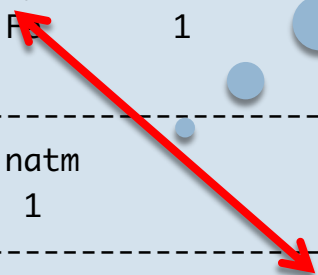
```
c-----Fe-----
  go  data/fe
c-----
c  brvtyp    a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
   bcc      5.27  ,    ,    ,    ,    ,    ,
c-----
c  edelt     ewidth  reltyp  sdftyp  magtyp  record
   0.001    1.0     nrl     mjw     mag     2nd
c-----
c  outtyp    bzqlty  maxitr  pmix
   update   4      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

その位置を占めるタイプ

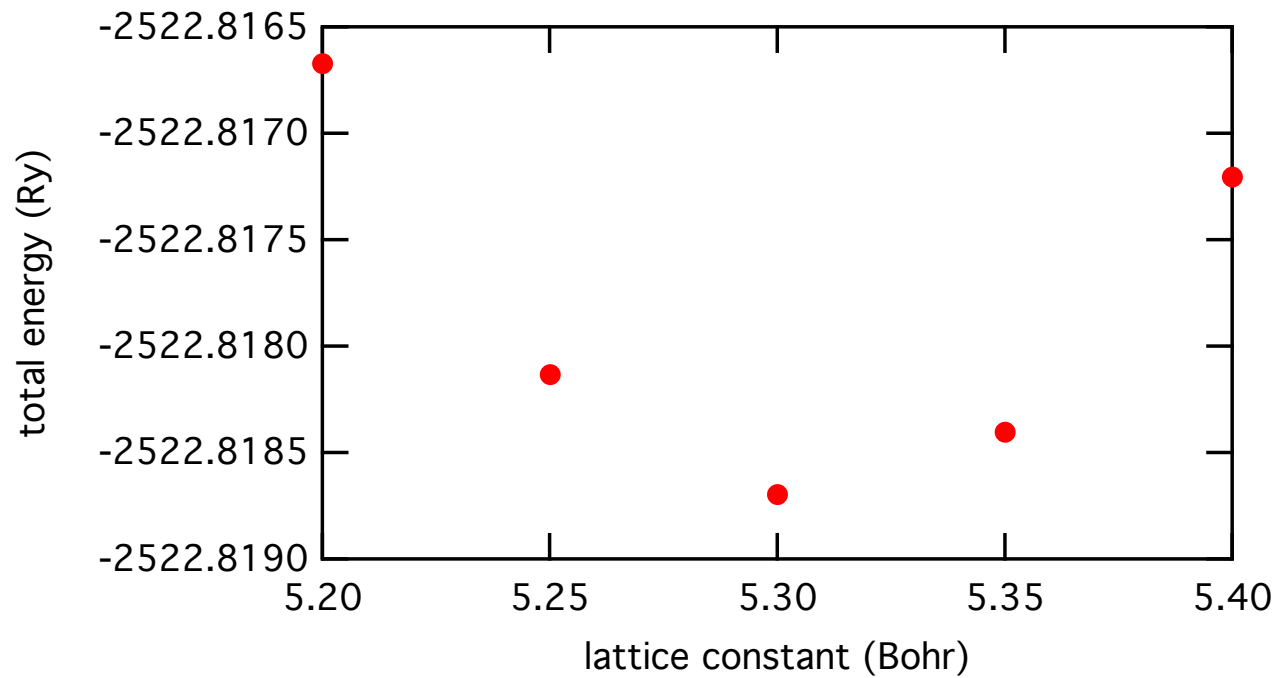
```
c-----Fe-----
  go  data/fe
c-----
c  brvtyp  a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  bcc      5.27  ,    ,    ,    ,    ,    ,
c-----
c  edelt   ewidth  reltyp  sdftyp  magtyp  record
  0.001    1.0     nr1     mjw     mag     2nd
c-----
c  outtyp  b
  update
c-----
c  ne
  1
c-----
c  type    ncmp    rmt    field    nxl    anclr    conc
  Fe      1      0.0    2
c-----
c  natm
  1
c-----
c  atmicx  0      0      0      type
  Fe
```

この2つの間に対応がとれていなければならない

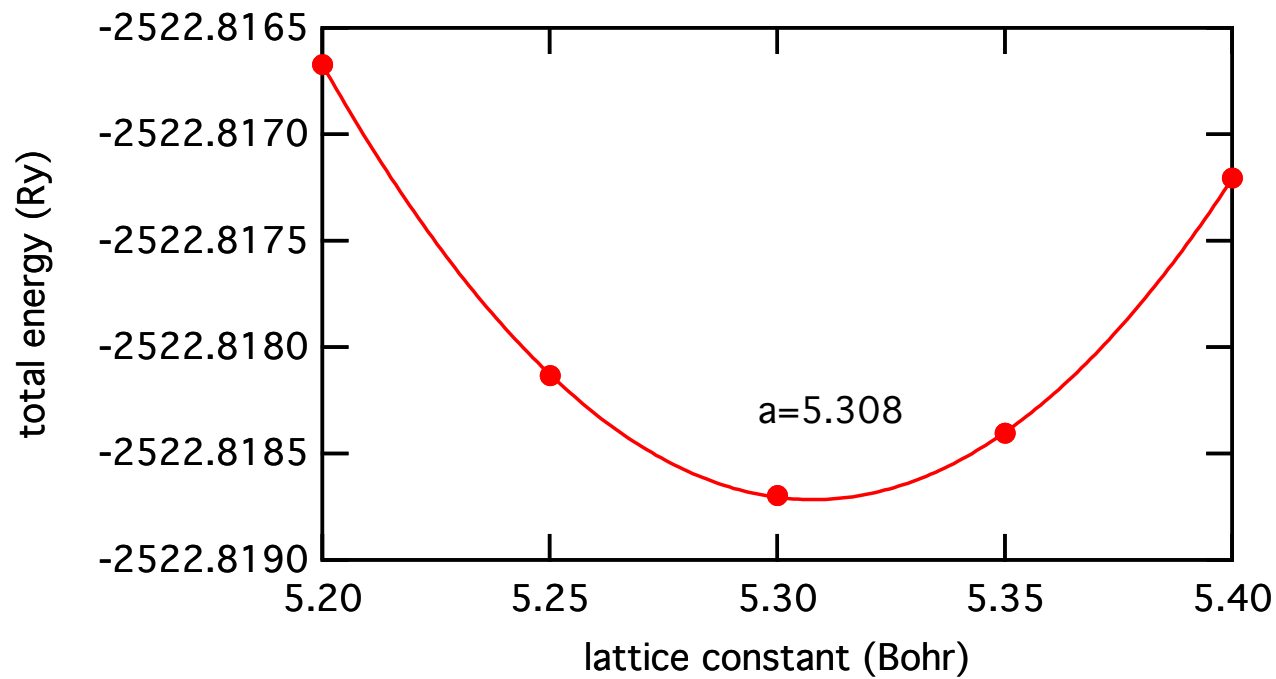
その位置を占めるタイプ



# 平衡格子定数(ゼロ圧力下での格子定数)の計算

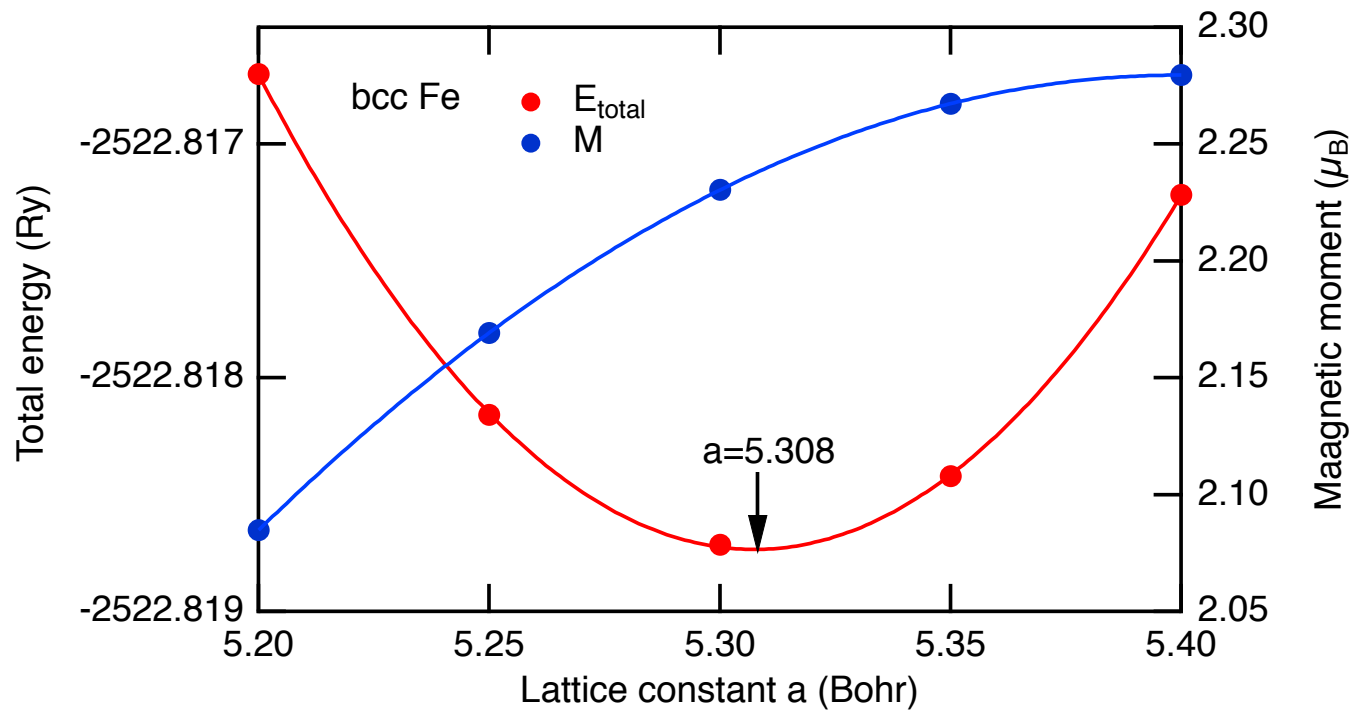


# 平衡格子定数(ゼロ圧力下での格子定数)の計算





# 平衡格子定数(ゼロ圧力下での格子定数)の計算



# DOSを描く

## Input file for DOS

```
c-----Fe-----
dos data/fe
c-----
c br a beta gamma
b , , ,
c-----
c edelt ewidth reltyp sdftyp magtyp record
0.001 1.0 nrl mjw mag 2nd
c-----
c outtyp bzqlty maxitr pmix
update 10 50 0.023
c-----
c ntyp 4
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-----
```

go → dos に書き換え

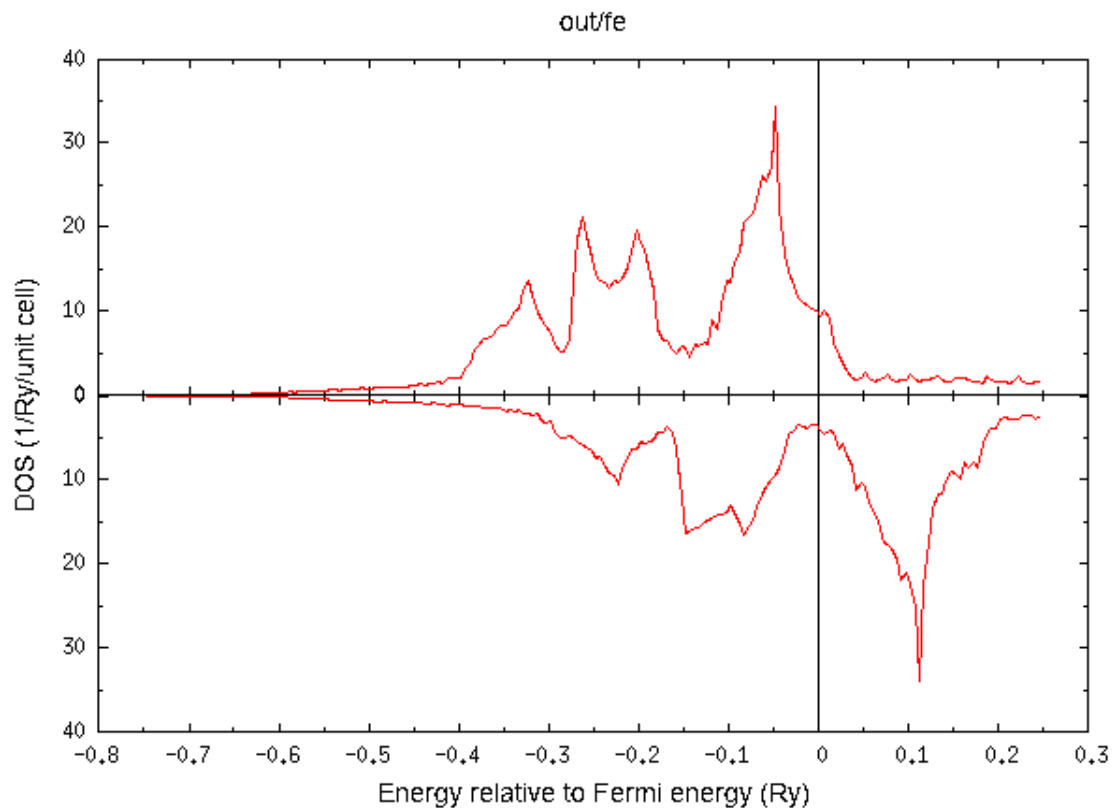
4 → 10~20:  
大きめの値に変更

大きめにとった方が  
DOSがスムーズに  
なって見た目が良い

# 状態密度(total DOS)

```
> gpd out/fe
```

gnuplotを呼び出して描画している  
Fe DOS



# エネルギー分散曲線を描く

```
c-----Fe-----
c      spc      data/fe
c-----
c      bragg    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      26      100
c-----
c      natm
c      1
c-----
c      atmicx    type
c      0      0      0      Fe
c-----
```

go → spc

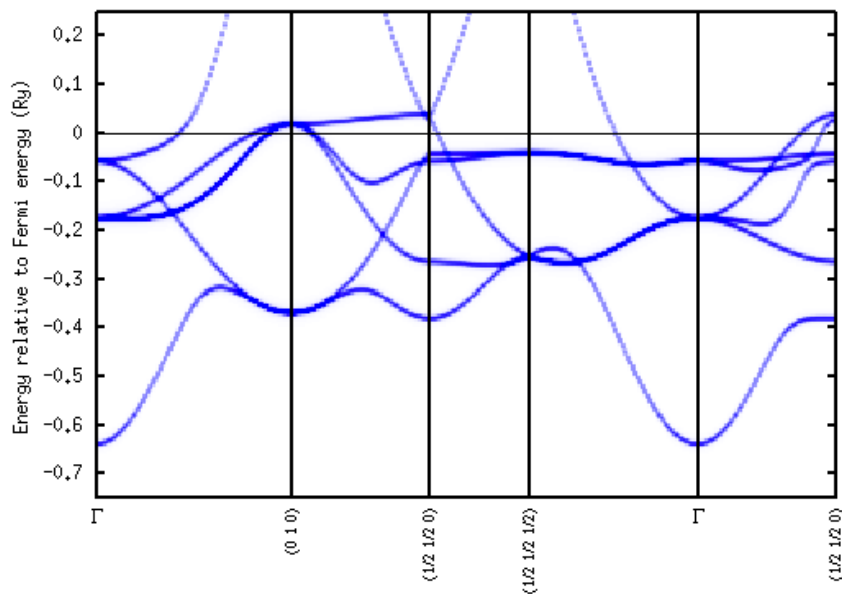
Input file for dispersion  
curve

# エネルギー分散曲線

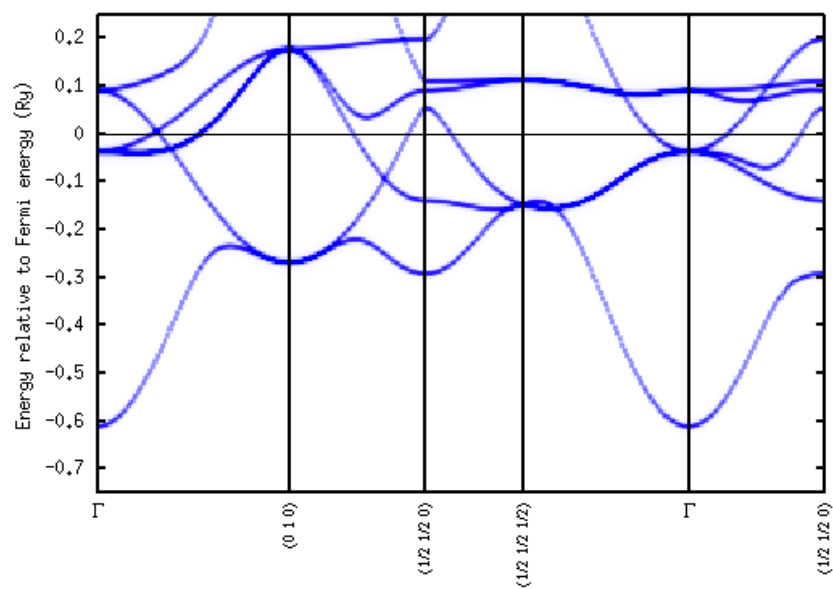
```
> spc data/fe_up.spc  
> spc data/fe_dn.spc
```

gunuplotを呼び出してイメージ描画している

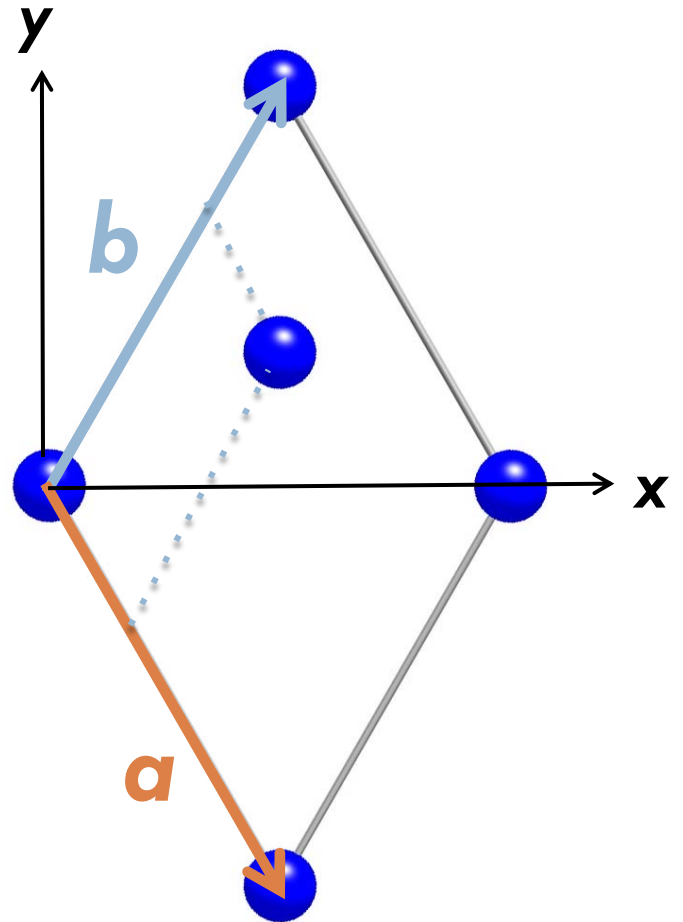
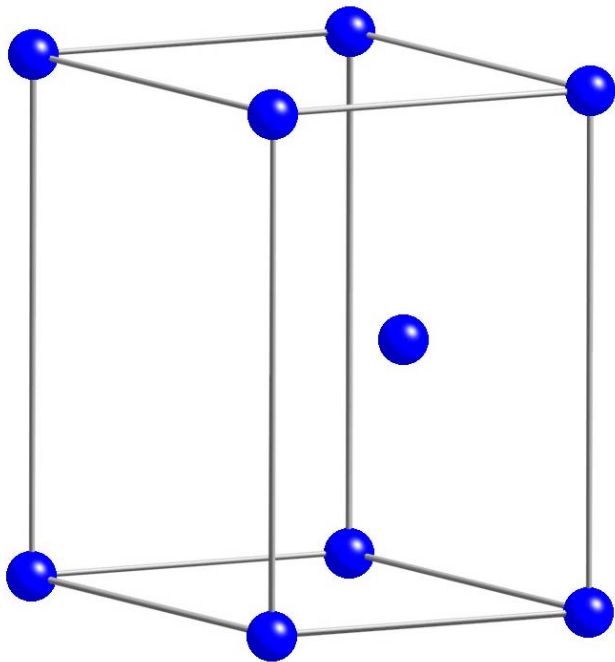
## Fe spin-up



## Fe spin-down



# hcp 構造



# Input file (Co)

```
c-----Co-----
  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    rmt     field  mxl  anclr  conc
   Co       1       1       0.0    2
                               27  100
c-----
c  natm
   2
c-----
c  atmicx                    type
   0           0           0           Co
   0.5        0.86602    0.81075    Co
c-----
```

# Input file (Co)

```
c-----Co-----
  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     nr1     mjw     mag     2nd
c-----
c  outtyp    bzqlty  maxitr  pmix
   update    4       50     0.023
c-----
c  ntyp
   1
c-----
c  type      ncmp      nm
   Co        1
c-----
c  natm
   2
c-----
c  atmicx      type
   0           0           0           Co
   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-----
  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     nr1     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
  1/2       0.86602  0.81075  Co
c-----
```

分数も使える

# Input file (Co)

```
c-----Co-----
  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  type
   0x      0y      0z      Co
   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-----
  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          type
   0x              0z      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

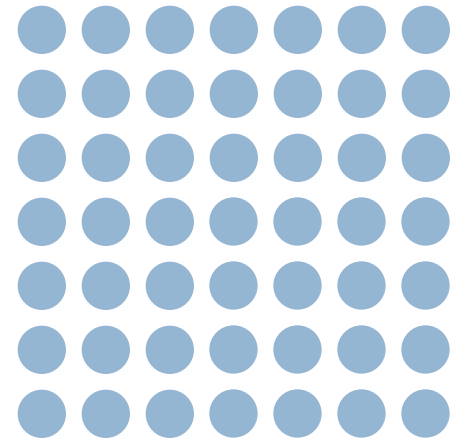
# 不純物問題

- 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

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



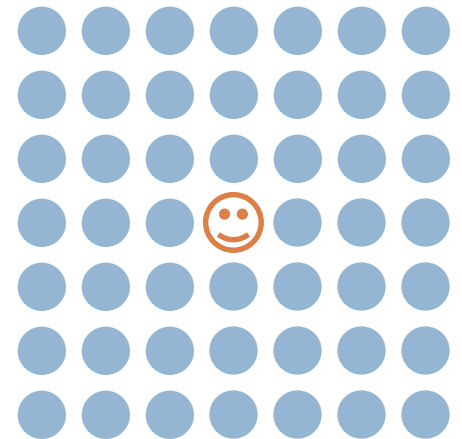
# 不純物問題

- 母体のグリーン関数

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

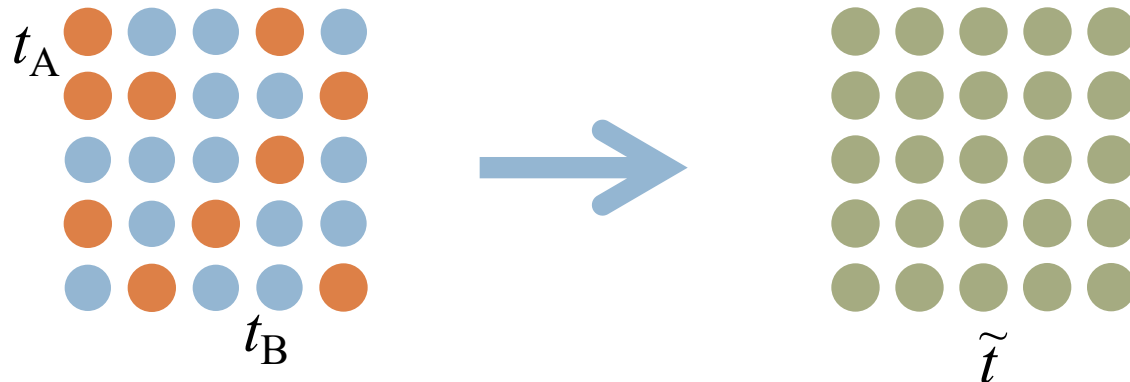
- 母体原子の一つが不純物原子に置き換わったときの散乱を考える

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



# 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  $t$  行列 (コヒーレント  $t$  行列) を考える。



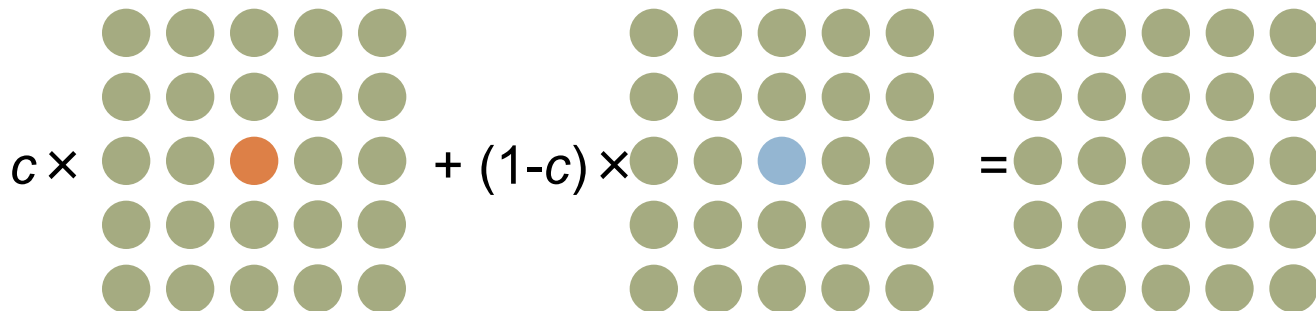
# CPA

- コヒーレントな行列は次の関係を満たす.

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

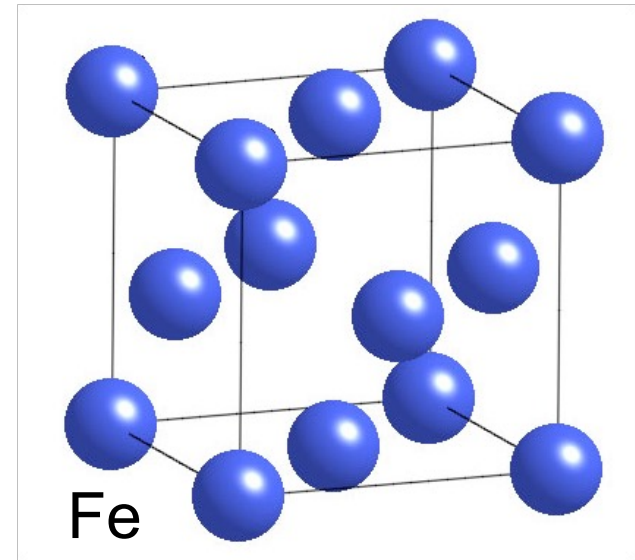
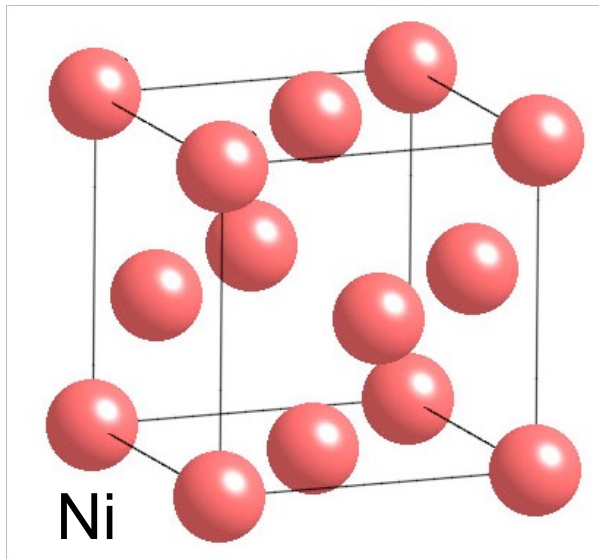
$$G^{A(B)} = \tilde{G} [1 - (t_{A(B)} - \tilde{t}) \tilde{G}]^{-1}$$

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



# NiFe 合金 (fcc)

- Ni 原子を Fe 原子で置き換えていく





# Input file

```
c-----NiFe-----
  go  data/nife
c-----
c  brvtyp    a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  fcc      6.55  ,      ,      ,      ,      ,
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
  NiFe      2      1      0.0    2
c-----
c  natm
  1
c-----
c  atmicx    0      0      0      type
  0      0      0      NiFe
c-----
```

タイプの名前をつける

# Input file

```
c-----NiFe-----
  go  data/nife
c-----
c  brvtyp    a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  fcc      6.55  ,      ,      ,      ,      ,
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
  NiFe      2      1      0.0    2
                                     26    80
c-----
c  natm
  1
c-----
c  atmicx    0      0      0      type
                                     NiFe
c-----
```

このタイプの位置を  
占める原子の種類は2個

```
c-----NiFe-----
  go  data/nife
c-----
c  brvtyp    a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  fcc      6.55  ,      ,      ,      ,      ,
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
  NiFe      2       1       0.0    2
                                     26    80
                                     28    20
c-----
c  natm
  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

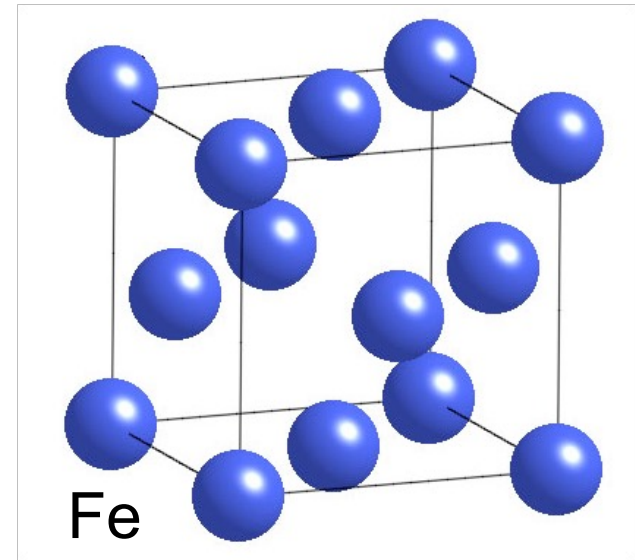
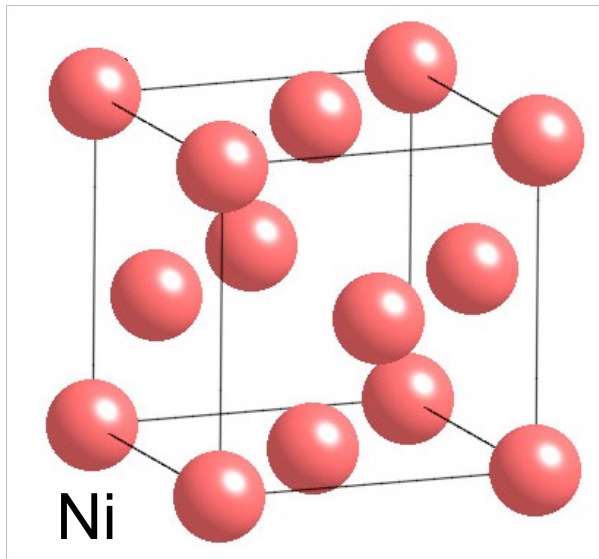
```
c-----NiFe-----
  go  data/nife
c-----
c  brvtyp  a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
  fcc      6.55  ,    ,    ,    ,    ,    ,
c-----
c  edelt   ewidth  reltyp  sdftyp  magtyp  record
  0.001   1.0     nrl     mjw     mag     2nd
c-----
c  outtyp  update
c-----
c  ncomp  1
c-----
c  type    ncmp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

この2つの間に対応がとれていなければならない

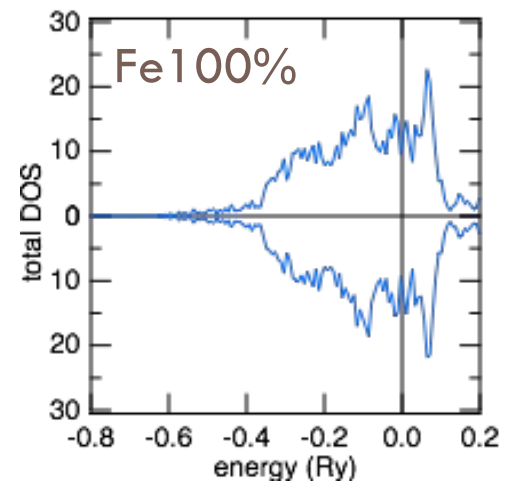
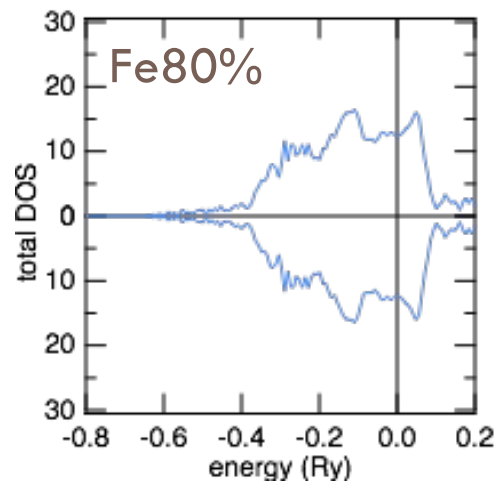
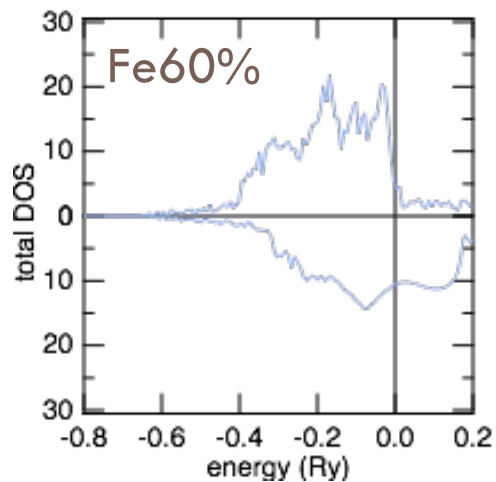
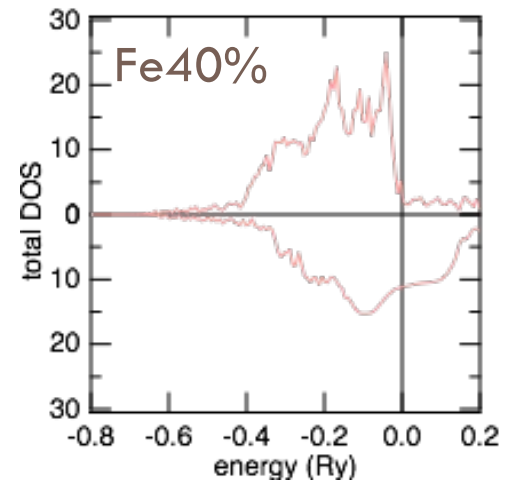
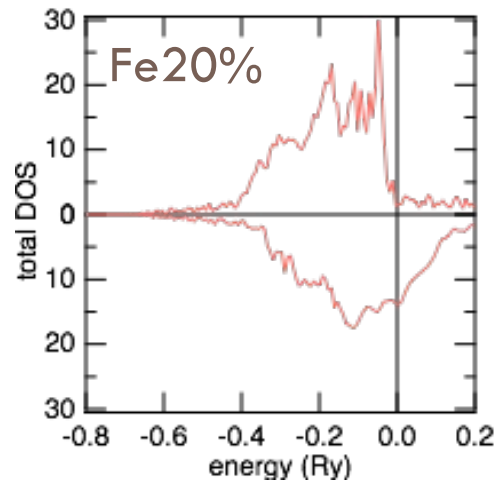
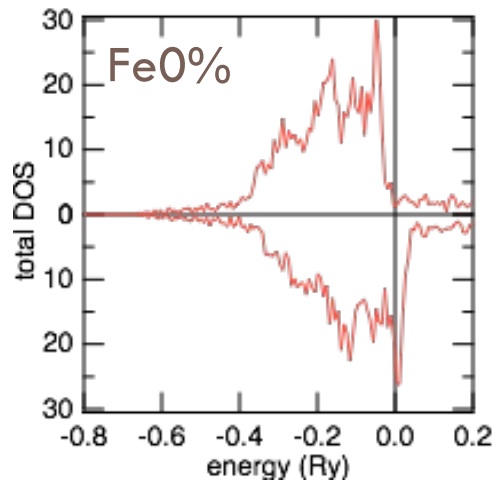


# NiFe 合金 (fcc)

- Ni 原子を Fe 原子で置き換えていく

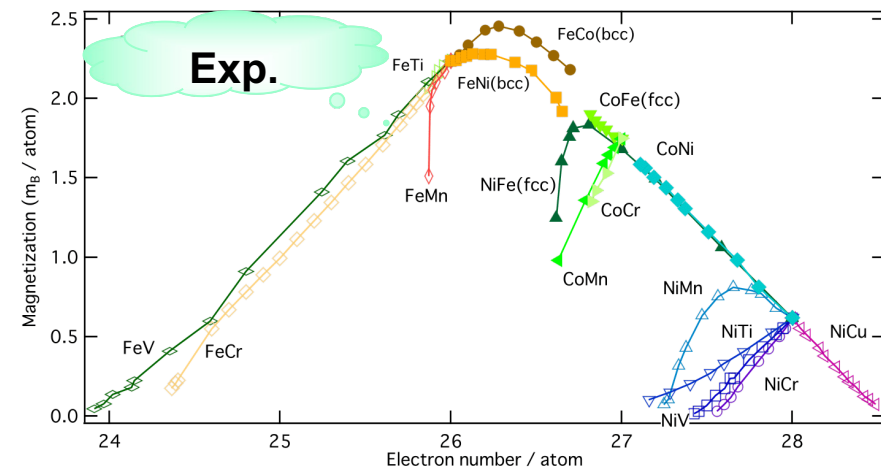
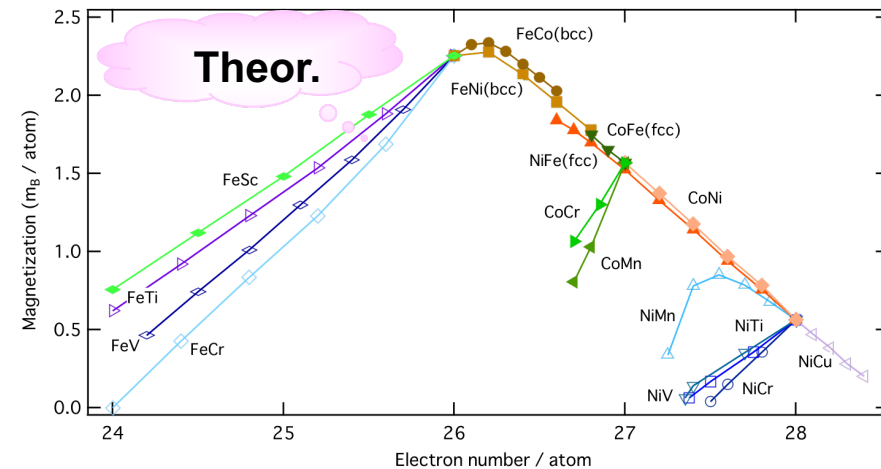


# NiFe 合金 (fcc)



# 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
c  go  data/feX
c-----
c  brvtyp  a      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  FeX   2    1   0.0   2    26    100
c                1    0
c-----
c  natm
c  1
c-----
c  atmicx  type
c  0        0        0        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

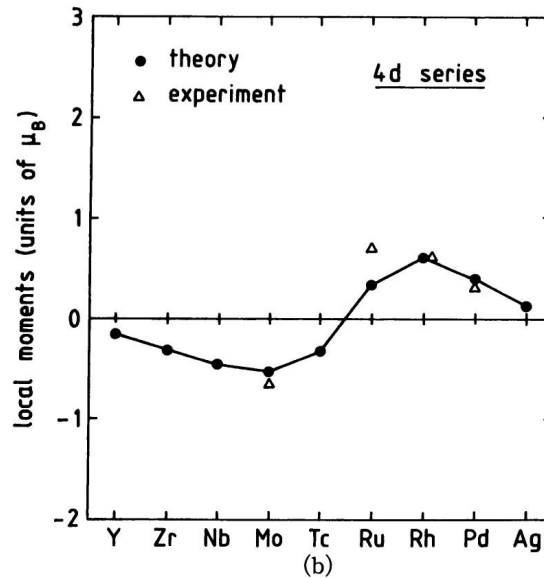
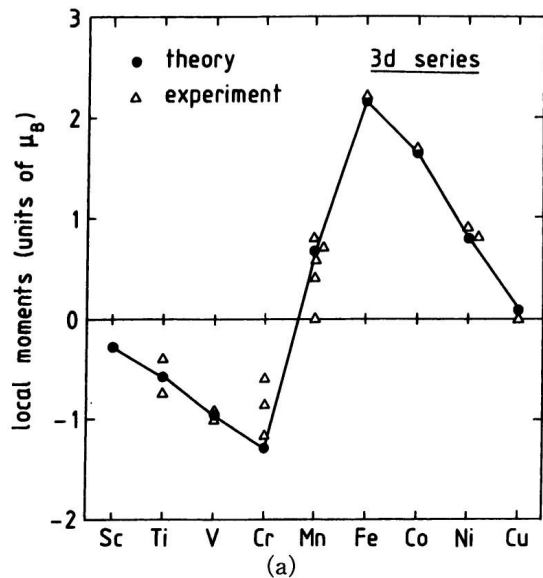


Fig. 2.14. Local moments of 3d impurities (a) and 4d impurities (b) in Fe. The triangles are experimental values from neutron scattering (see Ref. 110)).

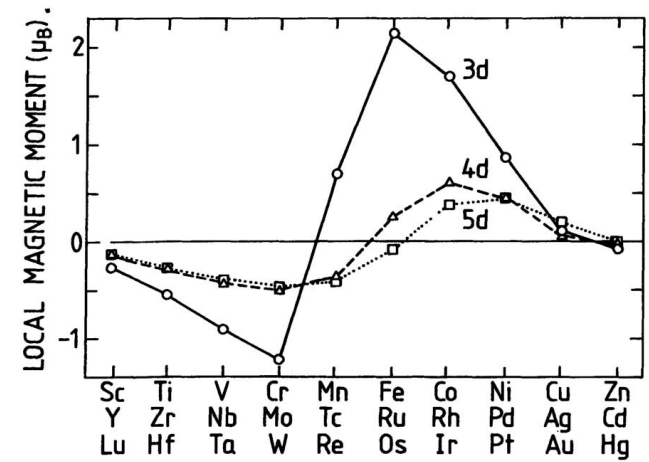


Fig. 2.15. Local moments of 5d impurities in Fe. For comparison also the results for 3d and 4d impurities are given.

# Fe中の遷移金属不純物

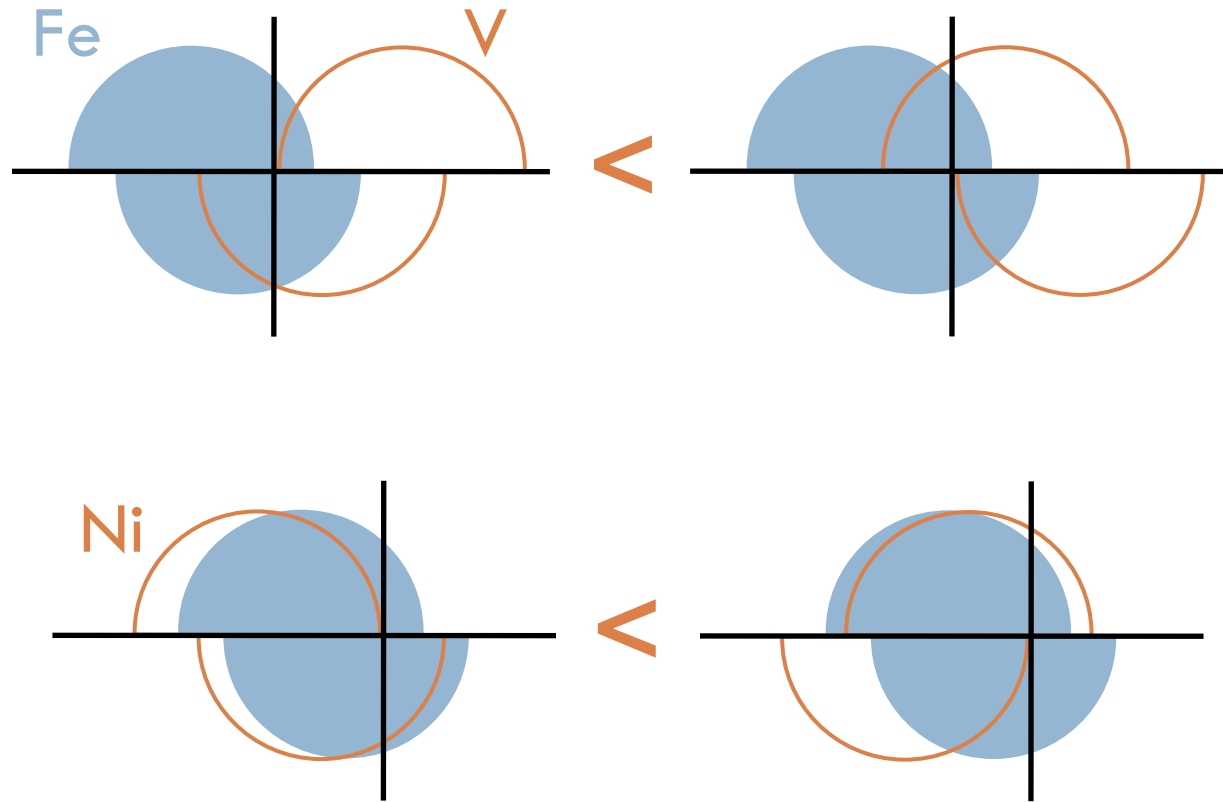
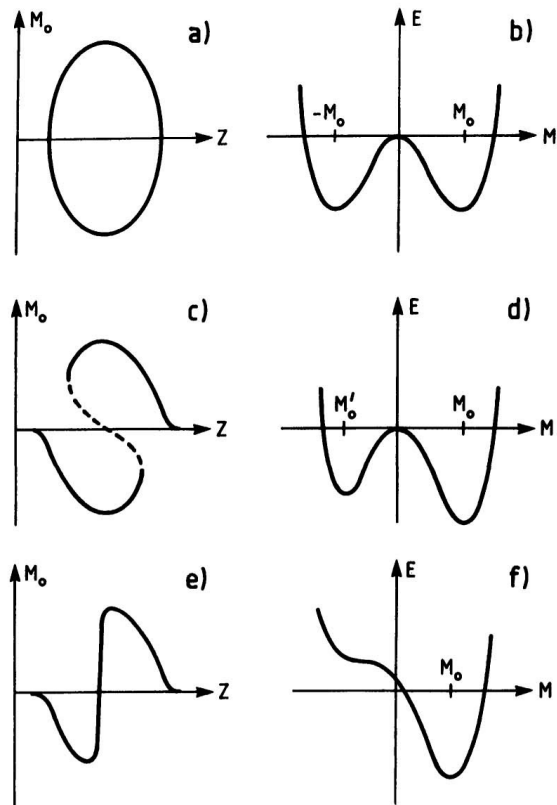
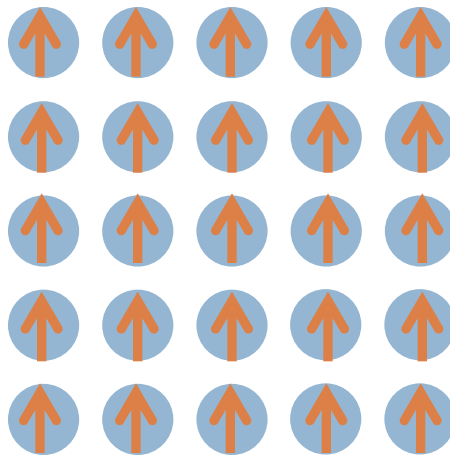


Fig. 2.13. Schematic behavior for the total energy  $E$  as a function of the variable impurity moment  $M_o$  as a function of the atomic number  $Z$ . (a) and (b) refer to  $3d$  impurities in a paramagnetic host like, e.g., Cu, (c) and (d) refer to a ferromagnet with a small host moment like Ni, and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

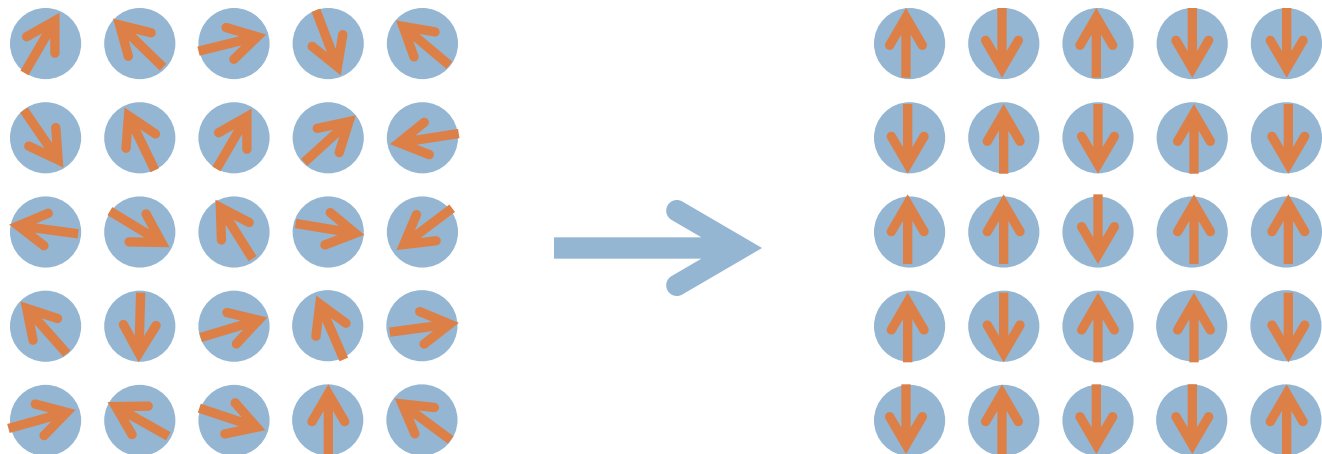
- 強磁性状態
  - 磁気モーメントは同じ向きを向いている



# 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

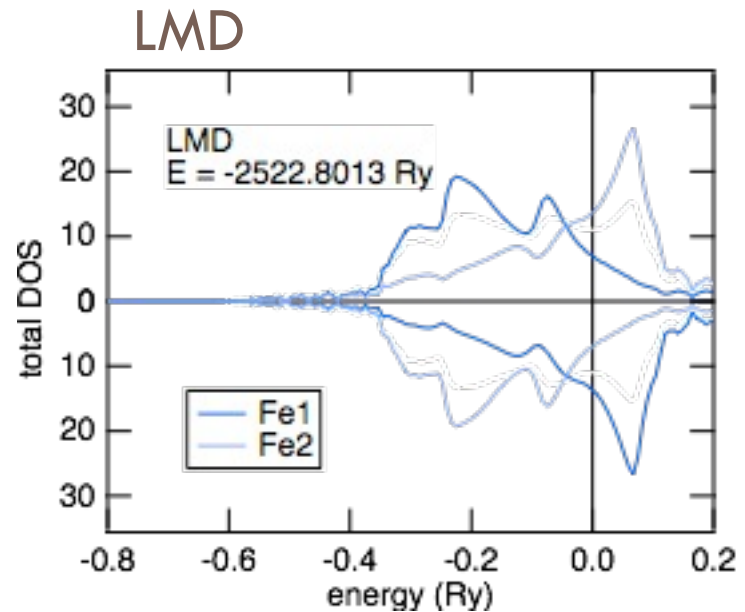
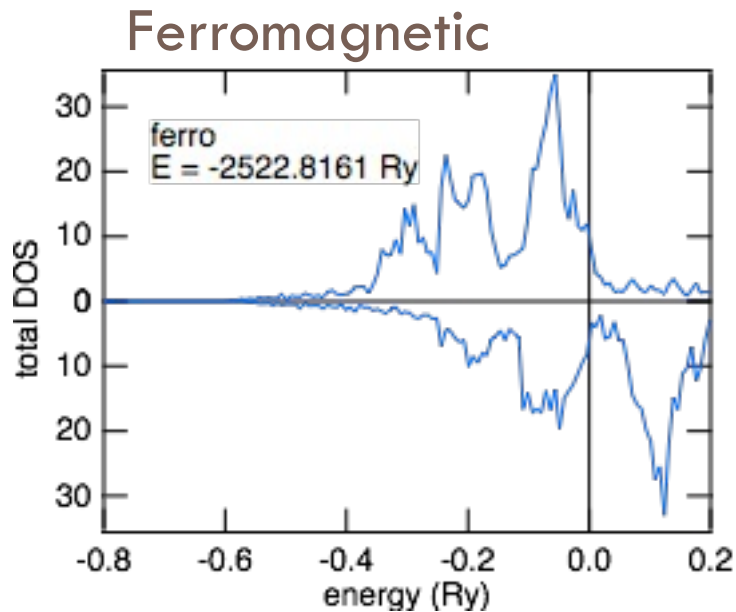
平均場近似では

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

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

1 mRy はほぼ  $T_C=100 \text{ K}$  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 Ry = 13.6 eV,  $k_B = 8.617 * 10^{-5}$  (eV/K)

実験値: ~ 1044 K

# 永久磁石材料 $\text{NdFe}_{12}\text{N}$

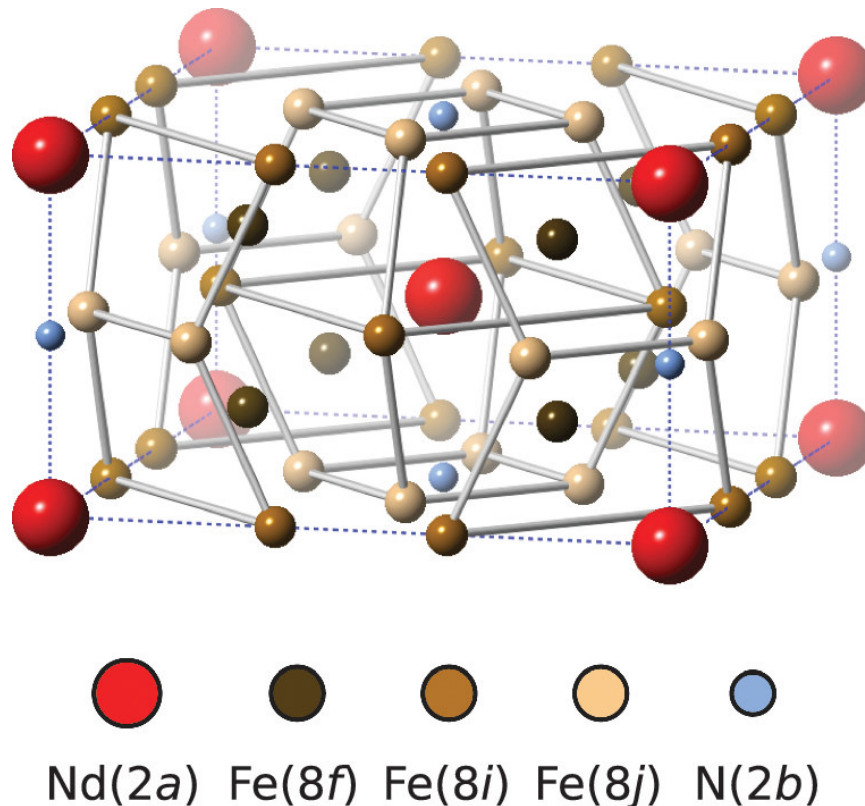


FIG. 1. Crystal structure of  $\text{NdFe}_{12}\text{N}$ . Along the  $\text{Nd}(2a)\text{-N}(2b)\text{-Nd}(2a)$  direction runs the  $c$ -axis. Perpendicular to it, the other two equivalent directions,  $a$ -axis and  $b$ -axis, span the  $\text{Nd}(2a)\text{-Fe}(8i)\text{-Fe}(8j)\text{-Nd}(2a)$  lines.



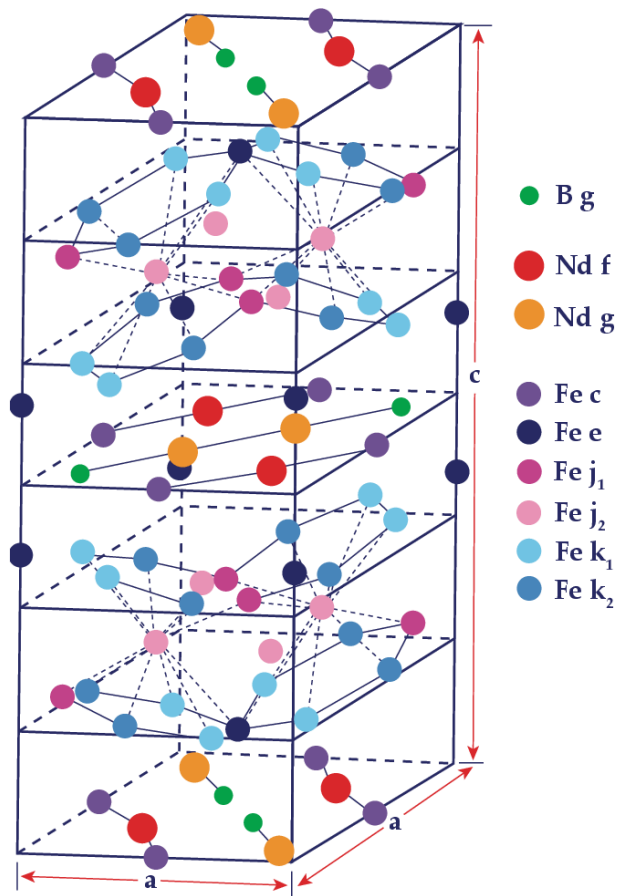
# Input File for NdFeN

```
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).

```
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

# 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/>