

マニュアル: J_{ij} の計算

株式会社アカデメイア

2025年3月12日

概要

磁気励起を記述する低エネルギー有効ハミルトニアンに現れる J_{ij} パラメータを AkaiKKR 第一原理電子状態計算コードによって計算する方法について説明する。

1 磁気励起と低エネルギー有効ハミルトニアン

スピン密度 $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ があたえられたとき、スピンの横ゆらぎ $\delta\mathbf{S}_\perp(\mathbf{r})$ による 2 次のエネルギーは次のように表される。

$$\delta^2 E_{\text{mag}}[\mathbf{S}(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \iint \delta\mathbf{S}_\perp(\mathbf{r}) \underbrace{\chi(\mathbf{r})^{-1} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \chi(\mathbf{r}')^{-1}}_{-2J(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \delta\mathbf{S}_\perp(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

$\chi(\mathbf{r})$ と $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ はそれぞれ非局所および局所帯磁率であり、これらは基底状態からの摂動エネルギーとして密度汎関数法 (DFT) を用いて計算可能である。下カッコで示された部分がスピンの横ゆらぎの間の交換相互作用定数 J になる。 J 自身は \mathbf{S} の汎関数になっていることに注意する必要がある。この表式を用いることによって低エネルギーの磁気励起を有効ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= -\frac{1}{2} \iint \mathbf{S}(\mathbf{r}) 2J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{S}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \int_{\Omega_i} d\mathbf{r} \int_{\Omega_j} d\mathbf{r}' \mathbf{S}(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}) 2J(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}, \mathbf{R}_j + \mathbf{r}') \mathbf{S}(\mathbf{R}_j + \mathbf{r}'), \end{aligned} \tag{1.1}$$

を用いて記述することが可能になる。2行目で、積分は体積 Ω_i の原子セル i 内で行う。ここで格子模型に移行する。すなわち、式 (1.1) における

セル内での \mathbf{r} 依存性を次のようにすべてそれぞれの原子セル内での平均値で置き換えてしまう.

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i &= \int_{\Omega_i} \mathbf{S}(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ J_{ij} &= \int_{\Omega_i} d\mathbf{r} \int_{\Omega_j} d\mathbf{r}' J(\mathbf{R}_i + \mathbf{r}, \mathbf{R}_j + \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (1.2)$$

これによって式 (1.1) 式はハイゼンベルグタイプのハミルトニアン

$$H_{\text{eff}} = - \sum_{(i,j)} \mathbf{S}_i 2J_{ij} \mathbf{S}_j. \quad (1.3)$$

に還元される. 和は (i, j) ペア ($i \neq j$) について行う.

式 (1.1) と (1.2) で定義された J_{ij} は KKR グリーン関数法を用いて要領よく計算できる. 計算の処方箋は Oguchi らによって与えられて, その後 Liechtenstein らによって詳細に説明された. \mathbf{S}_i と \mathbf{S}_j の相互作用エネルギーは原子 i と原子 j の散乱 t 行列をそれぞれ反対方向に角度 θ だけ回転させることによって得られる. このような回転によって生じるエネルギー変化は θ^2 のオーダーではあるが摂動としては一次摂動である. したがって力の定理 (force theorem) を適用することが可能になり, エネルギー変化は基底状態における V の変化に対するバンドエネルギー $E_B = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}$ の変化のみから得られる. サイト i での t -行列 t_i をスピン空間の 2×2 行列に拡張しておく, t_i の回転はユニタリ変換

$$U = e^{\frac{i}{2} \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}},$$

によって得られる. $\mathbf{e}_i = \mathbf{S}_i / |\mathbf{S}_i|$ であり, $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列である. 小さな回転 $\delta \mathbf{e}_i$ による t_i^{-1} の変化は次のように与えられる:

$$\delta t_i^{-1} = \frac{1}{2} \left(t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1} \right) \delta \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

角運動量成分を示すサフィックス L は省略する. 上記の表現を使用すると, 一次のエネルギー変化 $\delta E = \delta E_B$ は次のように表される.

$$\delta E = \frac{\theta^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{E_F+i0} dz \Im \text{tr}_L \left(t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1} \right) \tau_{\uparrow}^{ij} \left(t_{j\uparrow}^{-1} - t_{j\downarrow}^{-1} \right) \tau_{\downarrow}^{ji}. \quad (1.4)$$

トレースは角運動量にわたって取られる. ここで現れる τ^{ij} は散乱経路オペレーター (scattering-path operator) と呼ばれるものであり,

$$\tau^{ij} = t_i \delta_{ij} + t_i G^{ij} t_j,$$

と表される． G^{ij} は逆散乱グリーン関数である． τ^{ij} はより直接的には次のように計算される．

$$\tau_{LL'}^{ij} = \int_{\Omega} \frac{d\mathbf{k}}{\Omega} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left(t^{-1} - g(\mathbf{k}, E) \right)^{-1}. \quad (1.5)$$

$g(\mathbf{k}, E)$ は空格子に対する電子の伝播関数（プロパゲータ）である．式(1.4)によって与えられるエネルギー変化は，ハイゼンベルグモデルタイプのエネルギー式(1.3)に対応する．

$$\delta E = 2J_{ij}|\mathbf{S}_i||\mathbf{S}_j|(3 - \cos 2\theta - 2 \cos \theta) \simeq 2J_{ij}|\mathbf{S}_i||\mathbf{S}_j|\theta^2 \quad (1.6)$$

上記の式において， $\cos 2\theta$ を含む項は $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ に由来するものであるが， $\cos \theta$ に比例する項は単一の \mathbf{S} のみが回転されるときに発生する自己エネルギーである．式(1.4)と(1.6)を比較すると，次のことが結論される．

$$2J_{ij}|\mathbf{S}_i||\mathbf{S}_j| = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{E_F+i0} dz \Im \text{tr}_L \left(t_{i\uparrow}^{-1} - t_{i\downarrow}^{-1} \right) \tau_{\uparrow}^{ij} \left(t_{j\uparrow}^{-1} - t_{j\downarrow}^{-1} \right) \tau_{\downarrow}^{ji}. \quad (1.7)$$

系が無秩序な場合，CPA を使用して問題を扱うことができる．この場合，上で使用された τ_{ij} は次のように修正される．

$$\tau_{ij} \Rightarrow \left[1 + \tilde{\tau}^{ii} \left(t_i^{-1} - \tilde{t}^{-1} \right) \right]^{-1} \tilde{\tau}^{ij} \left[1 + \left(t_j^{-1} - \tilde{t}^{-1} \right) \tilde{\tau}^{jj} \right]^{-1}$$

$\tilde{\tau}^{ij}$ は式(1.5)で与えられる τ_{ij} に類似した量であり，式(1.5)中の t^{-1} を \tilde{t}^{-1} に置き換えたものである．上記の τ_{ij} の修正はCPAで用いられているシングルサイト近似の範囲で正しい取り扱いになっている．

いったん J_{ij} が得られれば，低エネルギー有効ハミルトニアン(1.3)をさまざまな理論的アプローチ，例えばモンテカルロシミュレーションなどの計算に利用できる．ハイゼンベルグモデルに関する平均場理論も，この文脈では有用であり，例えば有限温度処理と第一原理計算を非常にコンパクトに統合する可能性を与えている．

2 J_{ij} 計算の実装

前セクションで説明された J_{ij} の実装は以下の通りである．まず，インプットとして入力された計算すべき J_{ij} 相互作用レンジの距離に入る (i, j) ペアをサーチする．原点におかれたユニットセルから見て基本並進ベクトルの方向に ± 2 だけはなれたユニットセルまでを含む合計 125 個のユニットセルを対象にしてサーチが行われる．ただし，ペアになる原子のうち少なくとも 1 個は原点に置かれたユニットセルの中にあるものとする．これらの条件を満たす全てのペアがリストされる．

次に、この中から結晶学的に同等なものを取り去ったペアが独立なペアとしてリストされる。ここでスピン軌道相互作用を考慮する場合、AB ペアと BA ペアについて2個の原子を結ぶ直線上に反転中心が無ければジャロシンスキー・守谷相互作用が働くことから AB ペアと BA ペアは別の独立ペアとしてリストされる。スピン軌道相互作用を無視する場合には片方のペアだけがリストされる。これらの独立なペアにはペアを区別する番号 (index) が振られる。一方独立ではないものも含むすべてのペアにも別の番号 (pair#) が振られる。これらの作業はサブルーチン `apairs` で行われる。

得られたペアに関する情報をもとにサブルーチン `jkkcr` で式 (1.7) に基づいて J_{ij} の計算が行われる。実際にはまず k 空間における相互作用定数 $J(\mathbf{k})$ が計算され、そのフーリエ変換から J_{ij} が計算される。ここで計算されるのは通常の J_{ij} ではなく、式 (1.7) の左辺に相当する $|\mathbf{S}_i||\mathbf{S}_j|$ を含んだものであることに注意する必要がある。

また、ワイス場に相当する $\sum_j J_{0j}$ が計算されるがこれは式 (1.7) に関して k 空間でのトレースをとる計算に帰着され、この方法によれば無限遠点までのびた相互作用レンジにわたる相互作用の和がとられることになるが、サブルーチン `jkkcr` では相互作用レンジの中に納まるもののみからワイス場を計算している (磁気転移温度だけを計算するサブルーチン `curie` では k 空間でのトレースからワイス場を計算している)。

ワイス場からは平均場近似のもとでの磁気転移温度の計算が可能になる。ユニットセル中に複数の原子が含まれる場合には何種類ものワイス場が得られるが、独立なワイス場からのみなる相互作用行列を作り必要な場合にはそれをさらに対称化 (不規則合金の場合には同じサイトに入る異なった原子の確率が積の形で入ってくるためにそのままでは相互作用行列が対称ではなくなる) した上で対角化を行い、その最大固有値から磁気転移温度が計算される。

3 J_{ij} 計算の手順

J_{ij} の計算を行う場合には次のようなプロセスを実施する。まず、計算しようとしている系のセルフコンシステント計算を行い結果が十分収束していることを確認する。以下では SrMnO_3 の場合を例として説明する。セルフコンシステント計算に用いる入力ファイルは次の通りである。

```
#----- SrMnO3 -----
c  go  file
   go  data/SrMnO3
c-----
```

```

c  brvtyp      a      c/a  b/a  alpha  beta  gamma
sc      7.18474, , , , , ,
-----
c  edelt      ewidth  reltyp  sdftyp  magtyp  record
0.001    1.8      sra     pbeasa  mag     2nd
-----
c  outtyp      bzqlty  maxitr  pmix
update   4        200    0.02
-----
c  ntyp
3
-----
c  type      ncmp    rmt     field  mxl    anclr  conc
Sr       1       0       0.0    3     38    100
Mn       1       0       0.0    3     25    100
O        1       0       0.0    3     8     100
-----
c  natm
5
-----
c  atmicx      type
1/2a    1/2b    1/2c    Sr
0a      0b      0c      Mn
1/2a    0b      0c      O
0a      1/2b   0c      O
0a      0b      1/2c    O
-----

```

この入力ファイルを用いて

> ./specx<in/srmno3

のように計算を実行すると次のような結果が得られる。

```

15-Feb-2025
22:32:31
meshr  mse   ng   mxl
400    63    27    4

data read in
go-go file=data/SrMnO3
brvtyp=sc      a= 7.18474  c/a= 0.00000  b/a= 0.00000
alpha= 0.0  beta= 0.0  gamma= 0.0
edelt= 1.0E-03  ewidth= 1.800  reltyp=sra  sdftyp=pbeasa
magtyp=mag      record=2nd  outtyp=update  bzqlty=4
maxitr=200  pmix= 0.02500  mixtyp=tchb-brydn
ntyp= 3  natm= 5  ncmpx= 3

complex energy mesh
1(-1.8000, 0.0000) 2(-1.7999, 0.0013) 3(-1.7996, 0.0028)
4(-1.7991, 0.0046) 5(-1.7980, 0.0066) 6(-1.7964, 0.0089)
7(-1.7940, 0.0115) 8(-1.7905, 0.0145) 9(-1.7854, 0.0179)
10(-1.7785, 0.0217) 11(-1.7690, 0.0260) 12(-1.7563, 0.0308)
13(-1.7396, 0.0360) 14(-1.7179, 0.0417) 15(-1.6902, 0.0479)
16(-1.6554, 0.0544) 17(-1.6124, 0.0611) 18(-1.5602, 0.0680)
19(-1.4981, 0.0747) 20(-1.4257, 0.0812) 21(-1.3433, 0.0870)
22(-1.2516, 0.0921) 23(-1.1519, 0.0960) 24(-1.0464, 0.0987)
25(-0.9375, 0.0999) 26(-0.8281, 0.0997) 27(-0.7209, 0.0980)
28(-0.6186, 0.0950) 29(-0.5234, 0.0908) 30(-0.4369, 0.0857)
31(-0.3600, 0.0800) 32(-0.2931, 0.0738) 33(-0.2359, 0.0675)
34(-0.1880, 0.0612) 35(-0.1484, 0.0550) 36(-0.1162, 0.0491)
37(-0.0903, 0.0436) 38(-0.0697, 0.0386) 39(-0.0535, 0.0340)
40(-0.0408, 0.0298) 41(-0.0310, 0.0260) 42(-0.0235, 0.0227)
43(-0.0177, 0.0198) 44(-0.0134, 0.0172) 45(-0.0100, 0.0149)
46(-0.0075, 0.0129) 47(-0.0056, 0.0112) 48(-0.0042, 0.0096)
49(-0.0031, 0.0083) 50(-0.0023, 0.0072) 51(-0.0017, 0.0062)
52(-0.0013, 0.0053) 53(-0.0010, 0.0046) 54(-0.0007, 0.0040)
55(-0.0005, 0.0034) 56(-0.0004, 0.0029) 57(-0.0003, 0.0025)
58(-0.0002, 0.0022) 59(-0.0002, 0.0019) 60(-0.0001, 0.0016)
61(-0.0001, 0.0014) 62(-0.0001, 0.0012) 63(-0.0000, 0.0010)

```

```

file to be accessed=data/SrMnO3
created

lattice constant
bravais=sc a= 7.18474 c/a= 1.0000 b/a= 1.0000
alpha= 90.00 beta= 90.00 gamma= 90.00
unit cell volume= 370.87979(a.u.)
volume filling= 100.0%

primitive translation vectors (in units of a)
a=( 1.00000 0.00000 0.00000)
b=( 0.00000 1.00000 0.00000)
c=( 0.00000 0.00000 1.00000)

reciprocal lattice vectors (in units of 2*pi/a)
ga=( 1.00000 0.00000 0.00000)
gb=( 0.00000 1.00000 0.00000)
gc=( 0.00000 0.00000 1.00000)

type of site
type-Sr rmt= 0.48982 field= 0.000 lmxtyp= 3
component= 1 anclr= 38.00 conc= 1.0000
type-Mn rmt= 0.25039 field= 0.000 lmxtyp= 3
component= 1 anclr= 25.00 conc= 1.0000
type-O rmt= 0.32764 field= 0.000 lmxtyp= 3
component= 1 anclr= 8.00 conc= 1.0000

atoms in the unit cell
position= 0.50000000 0.50000000 0.50000000 type=Sr
position= 0.00000000 0.00000000 0.00000000 type=Mn
position= 0.50000000 0.00000000 0.00000000 type=O
position= 0.00000000 0.50000000 0.00000000 type=O
position= 0.00000000 0.00000000 0.50000000 type=O

***warn in spmain...eof detected; data generated
***msg in spmain...new ew, ez generated
ew= -0.20005 ez= 1.60000
***msg in spmain...aref void

preta= 0.28209 eta= 0.28209

symop E C4*3 C2*3 C4*3*3 C3*4 C3*2*4 C2'*6
g 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
u 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

last= 964 np= 81 ngpt= 365 nrpt= 329 nk= 35 nd= 21

atomic potential generated

itr= 1 rms error = -0.008
itr= 2 rms error = -0.745
itr= 3 rms error = -1.129
itr= 4 rms error = -1.403
itr= 5 rms error = -2.334
itr= 6 rms error = -2.190
itr= 7 rms error = -2.829
itr= 8 rms error = -3.272
itr= 9 rms error = -3.444
itr= 10 rms error = -4.443
itr= 11 rms error = -4.408
itr= 12 rms error = -4.946
itr= 13 rms error = -5.441
itr= 14 rms error = -5.711
itr= 15 rms error = -6.218
interval= 15 cpu time= 0.00 sec
nuclear charge=38.00

nl cnf energy
-----
1s 2.000 -1145.7834
2s 2.000 -153.0376
2p 6.000 -139.5449
3s 2.000 -23.6019
3p 6.000 -18.6625
3d 10.000 -9.6860
4s 2.000 -2.9721
4p 6.000 -1.7496
5s 2.000 -0.3327

itr= 1 rms error = 0.109
itr= 2 rms error = -0.516
itr= 3 rms error = -1.119
itr= 4 rms error = -1.737
itr= 5 rms error = -2.068
itr= 6 rms error = -2.111
itr= 7 rms error = -3.005
itr= 8 rms error = -2.985
itr= 9 rms error = -3.760
itr= 10 rms error = -4.271
itr= 11 rms error = -4.683
itr= 12 rms error = -5.119
itr= 13 rms error = -5.250
itr= 14 rms error = -6.175
interval= 14 cpu time= 0.00 sec
nuclear charge=25.00

nl cnf energy
-----
1s 2.000 -467.4616
2s 2.000 -53.8096
2p 6.000 -46.2083
3s 2.000 -6.2330
3p 6.000 -4.0624
3d 5.000 -0.6106
4s 2.000 -0.4758

itr= 1 rms error = 0.108
itr= 2 rms error = -0.370
itr= 3 rms error = -0.988

```

```

itr= 4      rms error = -1.447
itr= 5      rms error = -1.583
itr= 6      rms error = -2.467
itr= 7      rms error = -2.554
itr= 8      rms error = -3.264
itr= 9      rms error = -3.643
itr= 10     rms error = -3.980
itr= 11     rms error = -4.272
itr= 12     rms error = -5.160
itr= 13     rms error = -5.366
itr= 14     rms error = -5.908
itr= 15     rms error = -6.269
interval= 15  cpu time= 0.00 sec
nuclear charge= 8.00

```

nl	cnf	energy
1s	2.000	-37.7223
2s	2.000	-1.8858
2p	4.000	-0.8369

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

```

core configuration for Z= 38
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 5 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
down  1 1 3 1 3 5 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

```

core configuration for Z= 25
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

```

```

core configuration for Z= 8
state 1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 5s 5p 4f 5d 6s 6p 5f 6d 7s
up    1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
down  1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

```

**** self-consistent iteration starts ****
SrMn0.3
itr= 1 neu= 7.6797 moment= -0.1264 te= -9113.06340241 err= 1.260
itr= 2 neu= 6.9683 moment= -0.0701 te= -9117.56958790 err= 1.198
itr= 3 neu= -2.7787 moment= 0.0562 te= -9122.21973509 err= 1.033
itr= 4 neu= -2.0522 moment= 0.0736 te= -9123.66152026 err= 0.790

```

(途中省略)

```

itr= 80 neu= 0.0000 moment= 3.0104 te= -9127.81393087 err= -5.791
itr= 81 neu= -0.0000 moment= 3.0104 te= -9127.81393095 err= -5.459
itr= 82 neu= 0.0000 moment= 3.0104 te= -9127.81393092 err= -6.173
interval= 82  cpu time= 27.19 sec
sdftyp=pbeas reltyp=sra dmcp= 0.10000

```

```

SrMn0.3
itr= 82 neu 0.0000 chr,spn 33.00000000 3.0104332 intc,ints 0.0000 0.0000
rms err= -6.180 -7.229 -6.852 -6.173 -7.198 -6.801

```

```

ef= 0.4300825 0.4300825 def= 29.8733079 0.2014340
band energy -4.116192242
kinetic energy 9349.120134420
potential energy -14657.896505491
interaction energy -18476.934065338
total energy -9127.813930917
magnetization 0.6384 T

```

```

*** type-Sr Sr (z= 38.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =30.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.13859(s) 3.23082(p) 0.43675(d) 0.21068(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.13228(s) 3.20266(p) 0.41489(d) 0.20104(f)
total charge= 37.96771 valence charge (up/down)= 4.01683 3.95089
spin moment= 0.06594 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

```

```

core level (spin up )
-1169.8298860 Ry(1s) -157.4202272 Ry(2s) -139.7260723 Ry(2p)
-23.4111032 Ry(3s) -17.7053104 Ry(3p) -8.2933769 Ry(3d)
-1.9020925 Ry(4s) -0.5828309 Ry(4p)*
core level (spin down)
-1169.8296766 Ry(1s) -157.4200705 Ry(2s) -139.7258504 Ry(2p)
-23.4108340 Ry(3s) -17.7050100 Ry(3p) -8.2930271 Ry(3d)
-1.8998852 Ry(4s) -0.5803781 Ry(4p)*

```

```

hyperfine field of Sr
30.036 kG (core= -6.807 kG valence= 36.843 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-1.815 kG(1s) 0.356 kG(2s) 1.005 kG(3s) -6.353 kG(4s)

```

```

charge density at the nucleus
60774.0119 (core= 60768.9734 valence= 3.9249 )
core contribution
53934.0591(1s) 5733.4000(2s) 966.9154(3s) 134.5989(4s)

```

```

*** type-Mn Mn (z= 25.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =18.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.05022(s) 0.07286(p) 3.42647(d) 0.01142(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.04784(s) 0.07675(p) 0.69002(d) 0.01127(f)
total charge= 22.38685 valence charge (up/down)= 3.56097 0.82588
spin moment= 2.73510 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

```

```

core level (spin up )
-471.4561589 Ry(1s) -53.7668313 Ry(2s) -45.3825705 Ry(2p)
-5.5467818 Ry(3s) -3.2358351 Ry(3p)

```

```

core level (spin down)
-471.4573585 Ry(1s)          -53.6632721 Ry(2s)          -45.3040210 Ry(2p)
-5.3002213 Ry(3s)          -2.9948524 Ry(3p)

hyperfine field of Mn
-327.549 kG (core= -360.162 kG valence= 32.613 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-3.748 kG(1s)          -653.064 kG(2s)          296.651 kG(3s)

charge density at the nucleus
13166.2536 (core= 13161.1903 valence= 4.9546 )
core contribution
11901.7056(1s)          1100.6241(2s)          158.8607(3s)

*** type-0 0 (z= 8.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere = 2.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.96698(s) 2.40963(p) 0.06440(d) 0.03480(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.96002(s) 2.40280(p) 0.03050(d) 0.01268(f)
total charge= 8.88181 valence charge (up/down)= 3.47581 3.40601
spin moment= 0.06980 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

core level (spin up )
-36.6798599 Ry(1s)          -0.8263606 Ry(2s)*
core level (spin down)
-36.6785382 Ry(1s)          -0.8256780 Ry(2s)*

hyperfine field of 0
28.732 kG (core= -1.624 kG valence= 30.356 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-1.624 kG(1s)

charge density at the nucleus
320.3029 (core= 305.1201 valence= 15.1827 )
core contribution
305.1201(1s)

elapsed time 27.46 sec ( 24 threads)

OS: Linux
Host: rp
Machine: x86_64
numcor: 24

```

さらに結果を確認するための状態密度 (DOS) を得るには次のような入力を用いれば良い. go のかわりに dos を使い, またスムーズな DOS を描くために bzqlty が少し大きめの値 10 にとられている. この値は任意である.

```

#----- SrMnO3 -----
c go file
  dos data/SrMnO3
c-----
c brvtyp a c/a b/a alpha beta gamma
  sc 7.18474, , , , , ,
c-----
c edelt ewidth reltyp sdftyp magtyp record
  0.001 1.8 sra pbeasa mag 2nd
c-----
c outtyp bzqlty maxitr pmix
  update 10 200 0.025
c-----
c ntyp
  3
c-----
c type ncmp rmt field mxl anclr conc
  Sr 1 0 0.0 3 38 100
  Mn 1 0 0.0 3 25 100
  O 1 0 0.0 3 8 100

```



```

c-----
c  natm
c    5
c-----
c  atmicx          type
c    1/2a    1/2b    1/2c    Sr
c    0a     0b     0c     Mn
c    1/2a    0b     0c     0
c    0a     1/2b    0c     0
c    0a     0b     1/2c    0
c-----

```

得られる DOS の例を図 1 に示す.

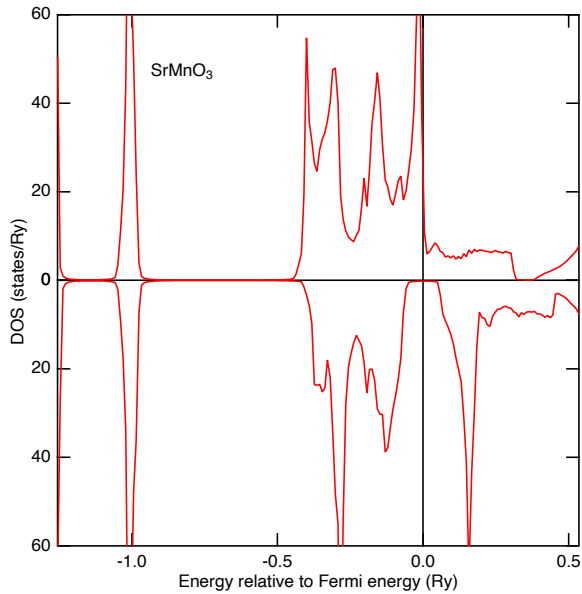


図 1: SrMnO₃ の状態密度曲線.

次に得られたセルフコンシステントなポテンシャルを用いて磁気相互作用 J_{ij} を計算する方法を示す. 用いるインプットは次のようになる.

```

#----- SrMnO3 -----
c  go file
c    j    data/SrMnO3
c-----
c  brvtyp    a      c/a    b/a    alpha    beta    gamma
c    sc      7.18474, , , , , ,
c-----

```

```

c  edelt      ewidth      reltyp      sdftyp      magtyp      record
   0.001      1.8          sra         pbeasa      mag         2nd
c-----
c  outtyp      bzqlty      maxitr      pmix
   update     10          200        0.025
c-----
c  ntyp
   3
c-----
c  type      ncmp      rmt      field      mxl      anclr      conc
   Sr        1         0        0.0        3        38        100
   Mn        1         0        0.0        3        25        100
   O         1         0        0.0        3         8        100
c-----
c  natm
   5
c-----
c  atmicx                      type
   1/2a      1/2b      1/2c      Sr
   0a        0b        0c        Mn
   1/2a      0b        0c        O
   0a        1/2b      0c        O
   0a        0b        1/2c      O
c-----

```

go のかわりに j を用いる。また、計算する相互作用 J_{ij} のレンジをここで指定することができて、たとえば j2.0 のようにすると格子定数 a を単位として 2.0 の距離も中に入る相互作用が計算されることになる。何も指定しない場合には 1.5 がデフォルト値として用いられる。bzqlty は小さくても良いが、その値は J_{ij} 結果に多少の影響を与える。この値によって生成された $v(k)$ ベクトルを用いてフーリエ変換がなされる。ここでは少し大きめの値 10 を用いている。これら以外の変更は必要ない。実行は

```
> ./specx<in/srmno3
```

によって行う点もセルフコンシステント計算等と変わらない。実行の結果次のような結果が得られる。

```

16-Feb-2025
10:14:51
meshr  mse  ng  mxl
 400    63  27   4

data read in
go=j      file=data/SrMnO3
brvtyp=sc  a= 7.18474  c/a= 0.00000  b/a= 0.00000
alpha= 0.0  beta= 0.0  gamma= 0.0
edelt= 1.0E-03  ewidth= 1.800  reltyp=sra  sdftyp=pbeasa
magtyp=mag  record=2nd  outtyp=quit  bzqlty=10
maxitr= 1  pmix= 0.02500  mixtyp=tchb-brydn
ntyp= 3  natm= 5  ncmpx= 3

```

```

complex energy mesh
1(-1.8000, 0.0000) 2(-1.7999, 0.0013) 3(-1.7996, 0.0028)
4(-1.7991, 0.0046) 5(-1.7980, 0.0066) 6(-1.7964, 0.0089)
7(-1.7940, 0.0115) 8(-1.7905, 0.0145) 9(-1.7854, 0.0179)
10(-1.7785, 0.0217) 11(-1.7690, 0.0260) 12(-1.7563, 0.0308)
13(-1.7396, 0.0360) 14(-1.7179, 0.0417) 15(-1.6902, 0.0479)
16(-1.6554, 0.0544) 17(-1.6124, 0.0611) 18(-1.5602, 0.0680)
19(-1.4981, 0.0747) 20(-1.4257, 0.0812) 21(-1.3433, 0.0870)
22(-1.2516, 0.0921) 23(-1.1519, 0.0960) 24(-1.0464, 0.0987)
25(-0.9375, 0.0999) 26(-0.8281, 0.0997) 27(-0.7209, 0.0980)
28(-0.6186, 0.0950) 29(-0.5234, 0.0908) 30(-0.4369, 0.0857)
31(-0.3600, 0.0800) 32(-0.2931, 0.0738) 33(-0.2359, 0.0675)
34(-0.1880, 0.0612) 35(-0.1484, 0.0550) 36(-0.1162, 0.0491)
37(-0.0903, 0.0436) 38(-0.0697, 0.0386) 39(-0.0535, 0.0340)
40(-0.0408, 0.0298) 41(-0.0310, 0.0260) 42(-0.0235, 0.0227)
43(-0.0177, 0.0198) 44(-0.0134, 0.0172) 45(-0.0100, 0.0149)
46(-0.0075, 0.0129) 47(-0.0056, 0.0112) 48(-0.0042, 0.0096)
49(-0.0031, 0.0083) 50(-0.0023, 0.0072) 51(-0.0017, 0.0062)
52(-0.0013, 0.0053) 53(-0.0010, 0.0046) 54(-0.0007, 0.0040)
55(-0.0005, 0.0034) 56(-0.0004, 0.0029) 57(-0.0003, 0.0025)
58(-0.0002, 0.0022) 59(-0.0002, 0.0019) 60(-0.0001, 0.0016)
61(-0.0001, 0.0014) 62(-0.0001, 0.0012) 63(-0.0000, 0.0010)

file to be accessed=data/SrMnO3

lattice constant
bravais=sc a= 7.18474 c/a= 1.0000 b/a= 1.0000
alpha= 90.00 beta= 90.00 gamma= 90.00
unit cell volume= 370.87979(a.u.)
volume filling= 100.0%

primitive translation vectors (in units of a)
a=( 1.00000 0.00000 0.00000)
b=( 0.00000 1.00000 0.00000)
c=( 0.00000 0.00000 1.00000)

reciprocal lattice vectors (in units of 2*pi/a)
ga=( 1.00000 0.00000 0.00000)
gb=( 0.00000 1.00000 0.00000)
gc=( 0.00000 0.00000 1.00000)

type of site
type-Sr      rmt= 0.48982 field= 0.000 lmxtyp= 3
              component= 1 anclr= 38.00 conc= 1.0000
type-Mn      rmt= 0.25039 field= 0.000 lmxtyp= 3
              component= 1 anclr= 25.00 conc= 1.0000
type-O       rmt= 0.32764 field= 0.000 lmxtyp= 3
              component= 1 anclr= 8.00 conc= 1.0000

atoms in the unit cell
position= 0.50000000 0.50000000 0.50000000 type=Sr
position= 0.00000000 0.00000000 0.00000000 type=Mn
position= 0.50000000 0.00000000 0.00000000 type=O
position= 0.00000000 0.50000000 0.00000000 type=O
position= 0.00000000 0.00000000 0.50000000 type=O

ew= -0.20005 ez= 1.60000
**msg in spmain...aref void

preta= 0.28209 eta= 0.28209

symop E C4*3 C2*3 C4^3*3 C3*4 C3^2*4 C2^*6
      g 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
      u 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

last= 964 np= 81 ngpt= 365 nrpt= 329 nk= 286 nd= 21

core configuration for Z= 38
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 5 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
down 1 1 3 1 3 5 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

core configuration for Z= 25
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 0
down 1 1 3 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

core configuration for Z= 8
state 1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 5s 5p 4f 5d 6s 6p 5f 6d 7s
up 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
down 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

***** self-consistent iteration starts *****
SrMnO3
itr= 1 neu= -0.0097 moment= 3.0102 te= -9127.81415293 err= -2.325
*** no convergence
interval= 1 cpu time= 2.20 sec
sdftyp=pbeas reltyp=sra dmpc= 0.10000
SrMnO3
itr= 1 neu -0.0097 chr,spn 33.0000000 3.0101881 intc,ints 0.0000 0.0000
rms err= -2.472 -2.358 -2.756 -2.613 -2.325 -2.689

ef= 0.4300825 0.4300825 def= 16.8648515 0.2012432
band energy -4.11642691
kinetic energy 9349.150218918
potential energy -14657.926840437
interaction energy -18476.964371846
total energy -9127.814152928
magnetization 0.6383 T

*** type-Sr Sr (z= 38.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =30.00000000
valence charge in the cell (spin up) = 0.13867(s) 3.23134(p) 0.43682(d) 0.21073(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.13230(s) 3.20269(p) 0.41490(d) 0.20105(f)
total charge= 37.96849 valence charge (up/down)= 4.01755 3.95094
spin moment= 0.06661 orbital moment= 0.00000

```

```

orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

core level (spin up )
-1169.8298860 Ry(1s) -157.4202272 Ry(2s) -139.7260723 Ry(2p)
-23.4111032 Ry(3s) -17.7053104 Ry(3p) -8.2933769 Ry(3d)
-1.9020925 Ry(4s) -0.5828309 Ry(4p)*

core level (spin down)
-1169.8296766 Ry(1s) -157.4200705 Ry(2s) -139.7258504 Ry(2p)
-23.4108340 Ry(3s) -17.7050100 Ry(3p) -8.2930271 Ry(3d)
-1.8998852 Ry(4s) -0.5803781 Ry(4p)*

hyperfine field of Sr
30.390 kG (core= -6.807 kG valence= 37.197 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-1.815 kG(1s) 0.356 kG(2s) 1.005 kG(3s) -6.353 kG(4s)

charge density at the nucleus
50774.0132 (core= 60768.9734 valence= 3.9262 )
core contribution
53934.0591(1s) 5733.4000(2s) 966.9154(3s) 134.5989(4s)

*** type-Mn Mn (z= 25.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =18.00000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.05021(s) 0.07272(p) 3.42970(d) 0.01139(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.04784(s) 0.07673(p) 0.69019(d) 0.01126(f)
total charge= 22.39005 valence charge (up/down)= 3.56401 0.82603
spin moment= 2.73798 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

core level (spin up )
-471.4561589 Ry(1s) -53.7668313 Ry(2s) -45.3825705 Ry(2p)
-5.5467818 Ry(3s) -3.2358351 Ry(3p)

core level (spin down)
-471.4573585 Ry(1s) -53.6632721 Ry(2s) -45.3040210 Ry(2p)
-5.3002213 Ry(3s) -2.9948524 Ry(3p)

hyperfine field of Mn
-327.948 kG (core= -360.162 kG valence= 32.214 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-3.748 kG(1s) -653.064 kG(2s) 296.651 kG(3s)

charge density at the nucleus
13166.2531 (core= 13161.1903 valence= 4.9541 )
core contribution
11901.7056(1s) 1100.6241(2s) 158.8607(3s)

*** type-0 0 (z= 8.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere = 2.00000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.96693(s) 2.40847(p) 0.06421(d) 0.03490(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.96003(s) 2.40276(p) 0.03051(d) 0.01268(f)
total charge= 8.88049 valence charge (up/down)= 3.47451 3.40598
spin moment= 0.06854 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

core level (spin up )
-36.6798599 Ry(1s) -0.8263606 Ry(2s)*

core level (spin down)
-36.6785382 Ry(1s) -0.8256780 Ry(2s)*

hyperfine field of 0
28.365 kG (core= -1.624 kG valence= 29.989 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-1.624 kG(1s)

charge density at the nucleus
320.3023 (core= 305.1201 valence= 15.1822 )
core contribution
305.1201(1s)

BZ-mesh regenerated
last= 964 np= 81 ngpt= 365 nrpt= 329 nk= 4004 nd= 21

J_ij calculation starts
dlimit= 1.50000
nc= 2 2 2 ncelx= 125 npairx= 1870
npair= 17 mjtbl= 360 ndata= 360
ncel= 5 npair= 17

J_ij
index site comp cell distance J_ij(Ry) J_ij(meV) mult
1 1 1 1 1 0.0000 0.0000 1.0000 1.0000000 0.000000 0.001525 6
2 1 1 1 1 0.0000 1.0000 1.0000 1.414214 -0.000000 -0.002102 12

Sr-Mn
index site comp cell distance J_ij(Ry) J_ij(meV) mult
3 1 2 1 1 0.0000 0.0000 0.0000 0.866025 0.000010 0.139948 8

Sr-0
index site comp cell distance J_ij(Ry) J_ij(meV) mult
4 1 3 1 1 0.0000 0.0000 0.0000 0.707107 -0.000002 -0.029383 12
5 1 5 1 1 0.0000 0.0000 1.0000 1.224745 -0.000000 -0.000067 24

Mn-Mn
index site comp cell distance J_ij(Ry) J_ij(meV) mult
6 2 2 1 1 0.0000 0.0000 1.0000 1.000000 -0.000940 -12.789173 6
7 2 2 1 1 0.0000 1.0000 1.0000 1.414214 -0.000082 -1.116067 12

Mn-0
index site comp cell distance J_ij(Ry) J_ij(meV) mult
8 2 3 1 1 0.0000 0.0000 0.0000 0.500000 -0.000176 -2.389602 6
9 2 3 1 1 0.0000 0.0000 1.0000 1.118034 0.000000 0.005335 24
10 2 5 1 1 0.0000 0.0000 1.0000 1.500000 -0.000002 -0.027853 6
11 2 3 1 1 0.0000 1.0000 1.0000 1.500000 -0.000000 -0.001309 24

```

index	site	comp	cell		distance	J_ij(Ry)	J_ij(meV)	mult
12	5 3	1 1	0.0000	0.0000	0.0000	0.707107	0.000000	0.005700
13	5 5	1 1	0.0000	0.0000	1.0000	1.000000	0.000000	0.005114
14	5 5	1 1	0.0000	1.0000	0.0000	1.000000	0.000000	0.000208
15	5 3	1 1	0.0000	1.0000	0.0000	1.224745	0.000000	0.000030
16	5 5	1 1	0.0000	1.0000	1.0000	1.414214	0.000000	0.000043
17	5 5	1 1	1.0000	1.0000	0.0000	1.414214	0.000000	0.000077

Tc (in mean field approximation) = 7.116K

pair#	atom1	atom2	comp1	comp2	cell	distance	J (meV)	index
1	1	2	1	1	(0 0 0)	0.866025	0.139948	3
2	1	2	1	1	(0 1 0)	0.866025	0.139948	3
3	2	1	1	1	(0 -1 0)	0.866025	0.139948	3
4	1	2	1	1	(0 0 1)	0.866025	0.139948	3
5	2	1	1	1	(0 0 -1)	0.866025	0.139948	3
6	1	2	1	1	(1 0 0)	0.866025	0.139948	3
7	2	1	1	1	(-1 0 0)	0.866025	0.139948	3
8	1	2	1	1	(0 1 1)	0.866025	0.139948	3
9	2	1	1	1	(0 -1 -1)	0.866025	0.139948	3
10	1	2	1	1	(1 0 1)	0.866025	0.139948	3
11	2	1	1	1	(-1 0 -1)	0.866025	0.139948	3
12	1	2	1	1	(0 1 0)	0.866025	0.139948	3
13	2	1	1	1	(-1 -1 0)	0.866025	0.139948	3
14	1	2	1	1	(1 1 1)	0.866025	0.139948	3
15	2	1	1	1	(-1 -1 -1)	0.866025	0.139948	3
16	1	3	1	1	(0 0 0)	0.707107	-0.029383	4
17	1	3	1	1	(0 1 0)	0.707107	-0.029383	4
18	3	1	1	1	(0 -1 0)	0.707107	-0.029383	4
19	1	5	1	1	(0 0 0)	0.707107	-0.029383	4
20	1	4	1	1	(1 0 0)	0.707107	-0.029383	4
21	4	1	1	1	(-1 0 0)	0.707107	-0.029383	4
22	1	3	1	1	(0 1 1)	0.707107	-0.029383	4
23	3	1	1	1	(0 -1 -1)	0.707107	-0.029383	4
24	1	3	1	1	(0 0 1)	0.707107	-0.029383	4
25	3	1	1	1	(0 0 -1)	0.707107	-0.029383	4
26	1	5	1	1	(1 0 0)	0.707107	-0.029383	4
27	5	1	1	1	(-1 0 0)	0.707107	-0.029383	4
28	1	4	1	1	(0 0 0)	0.707107	-0.029383	4
29	1	5	1	1	(0 1 0)	0.707107	-0.029383	4

(途中省略)

351	5	5	1	1	(1 1 0)	1.414214	0.000077	17
352	3	3	1	1	(0 -1 1)	1.414214	0.000077	17
353	4	4	1	1	(-1 0 -1)	1.414214	0.000077	17
354	5	5	1	1	(-1 -1 0)	1.414214	0.000077	17
355	3	3	1	1	(0 1 1)	1.414214	0.000077	17
356	4	4	1	1	(-1 0 1)	1.414214	0.000077	17
357	5	5	1	1	(-1 1 0)	1.414214	0.000077	17
358	3	3	1	1	(0 -1 -1)	1.414214	0.000077	17
359	4	4	1	1	(1 0 -1)	1.414214	0.000077	17
360	5	5	1	1	(1 -1 0)	1.414214	0.000077	17

elapsed time 91.54 sec (24 threads)

OS: Linux
Host: fp
Machine: x86_64
numcor: 24

結果の見方について説明する。

BZ-mesh regenerated

last= 964 np= 81 ngpt= 365 nrpt= 329 nk= 4004 nd= 21

のところから J_{ij} の計算が始まる。まず、ブリルアンゾーンの中の k が新たに作成される。これは2個の異なった位置に亘る量を計算することになり、結晶の持っていた対称性が反映されないためフーリエ変換にはブリルアンゾーンのなかの全ての k 点を用いる必要が出てくる。ただしスピン軌道相互作用を入れない場合には k 点の数は半分に減る。今の場合4004が用いられる k 点の数である。

その後続く

J_ij calculation starts

dlimit= 1.50000

nc= 2 2 2 ncelx= 125 npairx= 1870

```
npair=    17  mjtbl=   360  ndata=   360
ncel=    5  npair=    17
```

dlimit (= 1.5) は計算される相互作用のレンジであり、その中に入る npair (= 17) は独立なペアの数、ndata (= 360) はすべてのペアの数である。

これらのデータの後に J_{ij} の値が出力される。最小のブロックは独立なペアの J_{ij} の値が出力される。今の場合に、Sr-Sr, Sr-Mn, Sr-O, Mn-Mn, Mn-O, O-O の順番に表示される。

このブロックの次に

```
Tc (in mean field approximation) =    7.116K
```

のように、計算された J_{ij} を用いて平均場近似のもとでの磁気転移温度 T_C が表示される。今の場合、 T_C は 7.116K と見積もられている。

次のブロックでは結晶学的に同等なものを含みすべてのペアについての J_{ij} の値が出力される。これらのブロックに表示されるデータの意味については最終ページ以降の図 2, 3 に説明されている。

4 T_C の直接計算

式(1.7)を、与えられた i について j に関して無限遠点までの和を実行すればワイス場を計算することができるが、ユニットセルあたり磁性原子が 1 個の場合はこれは i, j に関する総和になるので単なるトレースである。このトレースは k 空間で行えば良いのでフーリエ変換等の手続きなしに式(1.7)を直接 k 表示で計算して成分を行えば良い。ただしユニットセルに複数個の磁性原子が存在する場合には結晶学的に同等でない部分格子について張られた行列についてこれを行う。さらに、同じサイトを複数個の異なった原子が占める確率がある場合はそのままでは行列が対称にはならないが、確率の 1/2 乗で正規化を行うなどによって容易に対称化される。このようにして得られたワイス場の行列の最大固有値から平均場近似の T_C が計算される。 J_{ij} を経由して求める場合には和に含めるレンジに制限があり、無限遠点まで取るわけにはいかないが今のような $v(k)$ 空間でのトレースをとれば少なくとも形式的には無限遠点まで和をとったことになる。

5 T_C 直接計算の手順

T_C の直接計算を行う場合、セルフコンシステント計算を終了するまでのプロセスは J_{ij} の計算と全く同様である。そのあとのプロセスは SrMnO_3 の場合には以下のインプットを用いる。

```
#----- SrMnO3 -----
c go file
  tc data/SrMnO3
c-----
c brvtyp a c/a b/a alpha beta gamma
  sc 7.18474, , , , ,
c-----
c edelt ewidth reltyp sdftyp magtyp record
  0.001 1.8 sra pbeasa mag 2nd
c-----
c outtyp bzqlty maxitr pmix
  update 10 200 0.025
c-----
c ntyp
  3
c-----
c type ncmp rmt field mxl anclr conc
  Sr 1 0 0.0 3 38 100
  Mn 1 0 0.0 3 25 100
  O 1 0 0.0 3 8 100
c-----
c natm
  5
c-----
c atmicx type
  1/2a 1/2b 1/2c Sr
  0a 0b 0c Mn
  1/2a 0b 0c 0
  0a 1/2b 0c 0
  0a 0b 1/2c 0
c-----
```

go のかわりに tc を用いる。これ以外の変更は必要ない。実行は

```
> ./specx<in/srmno3
```

によって行う。実行の結果次のような結果が得られる。

```
5-Mar-2025
15:25:33
meshr mse ng mxl
400 63 27 4
```

```

data read in
go=tc file=data/SrMnO3
brvtyp=sc a= 7.18474 c/a= 0.00000 b/a= 0.00000
alpha= 0.0 beta= 0.0 gamma= 0.0
edelt= 1.0E-03 ewidth= 1.800 reltyp=sra sdftyp=pbeasa
magtyp=mag record=2nd outtyp=quit bzqlty=10
maxitr= 1 pmix= 0.02500 mixtyp=tchb-brydn
ntyp= 3 natm= 5 ncmpx= 3

complex energy mesh
1(-1.8000, 0.0000) 2(-1.7999, 0.0013) 3(-1.7996, 0.0028)
4(-1.7991, 0.0046) 5(-1.7980, 0.0066) 6(-1.7964, 0.0089)
7(-1.7940, 0.0115) 8(-1.7905, 0.0145) 9(-1.7854, 0.0179)
10(-1.7785, 0.0217) 11(-1.7690, 0.0260) 12(-1.7563, 0.0308)
13(-1.7396, 0.0360) 14(-1.7179, 0.0417) 15(-1.6902, 0.0479)
16(-1.6554, 0.0544) 17(-1.6124, 0.0611) 18(-1.5602, 0.0680)
19(-1.4981, 0.0747) 20(-1.4257, 0.0812) 21(-1.3433, 0.0870)
22(-1.2516, 0.0921) 23(-1.1519, 0.0960) 24(-1.0464, 0.0987)
25(-0.9375, 0.0999) 26(-0.8281, 0.0997) 27(-0.7209, 0.0980)
28(-0.6186, 0.0950) 29(-0.5234, 0.0908) 30(-0.4369, 0.0857)
31(-0.3600, 0.0800) 32(-0.2931, 0.0738) 33(-0.2359, 0.0675)
34(-0.1880, 0.0612) 35(-0.1484, 0.0550) 36(-0.1162, 0.0491)
37(-0.0903, 0.0436) 38(-0.0697, 0.0386) 39(-0.0535, 0.0340)
40(-0.0408, 0.0298) 41(-0.0310, 0.0260) 42(-0.0235, 0.0227)
43(-0.0177, 0.0198) 44(-0.0134, 0.0172) 45(-0.0100, 0.0149)
46(-0.0075, 0.0129) 47(-0.0056, 0.0112) 48(-0.0042, 0.0096)
49(-0.0031, 0.0083) 50(-0.0023, 0.0072) 51(-0.0017, 0.0062)
52(-0.0013, 0.0053) 53(-0.0010, 0.0046) 54(-0.0007, 0.0040)
55(-0.0005, 0.0034) 56(-0.0004, 0.0029) 57(-0.0003, 0.0025)
58(-0.0002, 0.0012) 59(-0.0002, 0.0019) 60(-0.0001, 0.0016)
61(-0.0001, 0.0014) 62(-0.0001, 0.0012) 63(-0.0000, 0.0010)

file to be accessed=data/SrMnO3

lattice constant
bravais=sc a= 7.18474 c/a= 1.0000 b/a= 1.0000
alpha= 90.00 beta= 90.00 gamma= 90.00
unit cell volume= 370.87979(a.u.)
volume filling= 100.0%

primitive translation vectors (in units of a)
a=( 1.00000 0.00000 0.00000)
b=( 0.00000 1.00000 0.00000)
c=( 0.00000 0.00000 1.00000)

reciprocal lattice vectors (in units of 2*pi/a)
ga=( 1.00000 0.00000 0.00000)
gb=( 0.00000 1.00000 0.00000)
gc=( 0.00000 0.00000 1.00000)

type of site
type-Sr rmt= 0.48982 field= 0.000 lmxtyp= 3
component= 1 anclr= 38.00 conc= 1.0000
type-Mn rmt= 0.25039 field= 0.000 lmxtyp= 3
component= 1 anclr= 25.00 conc= 1.0000
type-O rmt= 0.32764 field= 0.000 lmxtyp= 3
component= 1 anclr= 8.00 conc= 1.0000

atoms in the unit cell
position= 0.50000000 0.50000000 0.50000000 type=Sr
position= 0.00000000 0.00000000 0.00000000 type=Mn
position= 0.50000000 0.00000000 0.00000000 type=O
position= 0.00000000 0.50000000 0.00000000 type=O
position= 0.00000000 0.00000000 0.50000000 type=O

ew= -0.20005 ez= 1.60000
**msg in spmain...aref void

preta= 0.28209 eta= 0.28209

symop E C4*3 C2*3 C4'3*3 C3*4 C3'2*4 C2'*6
g 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
u 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

last= 964 np= 81 ngpt= 365 nrpt= 329 nk= 286 nd= 21

core configuration for Z= 38
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 5 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
down 1 1 3 1 3 5 1 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

core configuration for Z= 25
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

core configuration for Z= 8
state 1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 5s 5p 4f 5d 6s 6p 5f 6d 7s
up 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
down 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

**** self-consistent iteration starts ****
SrMnO3
itr= 1 neu= -0.0097 moment= 3.0102 te= -9127.81415293 err= -2.325
*** no convergence
interval= 1 cpu time= 2.20 sec
sdftyp=pbeas reltyp=sra dmpc= 0.10000
SrMnO3
itr= 1 neu= -0.0097 chr,spm 33.0000000 3.0101881 intc,ints 0.0000 0.0000
rms err= -2.472 -2.358 -2.756 -2.613 -2.325 -2.689

ef= 0.4300825 0.4300825 def= 16.8648515 0.2012432
band energy -4.116442691
kinetic energy 9349.150218918
potential energy -14657.926840437
interaction energy -18476.964371846
total energy -9127.814152928
magnetization 0.6383 T

```



```

*** type-Sr      Sr (z= 38.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =30.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.13867(s) 3.23134(p) 0.43682(d) 0.21073(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.13230(s) 3.20269(p) 0.41490(d) 0.20105(f)
total charge= 37.96849 valence charge (up/down)= 4.01755 3.95094
spin moment= 0.06661 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

```

```

core level (spin up )
-1169.8298860 Ry(1s) -157.4202272 Ry(2s) -139.7260723 Ry(2p)
-23.4111032 Ry(3s) -17.7053104 Ry(3p) -8.2933769 Ry(3d)
-1.9020925 Ry(4s) -0.5828309 Ry(4p)*
core level (spin down)
-1169.8296766 Ry(1s) -157.4200705 Ry(2s) -139.7258504 Ry(2p)
-23.4108340 Ry(3s) -17.7050100 Ry(3p) -8.2930271 Ry(3d)
-1.8998852 Ry(4s) -0.5803781 Ry(4p)*

```

```

hyperfine field of Sr
30.390 kG (core= -6.807 kG valence= 37.197 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-1.815 kG(1s) 0.356 kG(2s) 1.005 kG(3s) -6.353 kG(4s)

```

```

charge density at the nucleus
60774.0132 (core= 60768.9734 valence= 3.9262 )
core contribution
53934.0591(1s) 5733.4000(2s) 966.9154(3s) 134.5989(4s)

```

```

*** type-Mn      Mn (z= 25.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere =18.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.05021(s) 0.07272(p) 3.42970(d) 0.01139(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.04784(s) 0.07673(p) 0.69019(d) 0.01126(f)
total charge= 22.39005 valence charge (up/down)= 3.56401 0.82603
spin moment= 2.73798 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

```

```

core level (spin up )
-471.4561589 Ry(1s) -53.7668313 Ry(2s) -45.3825705 Ry(2p)
-5.5467818 Ry(3s) -3.2358351 Ry(3p)
core level (spin down)
-471.4573585 Ry(1s) -53.6632721 Ry(2s) -45.3040210 Ry(2p)
-5.3002213 Ry(3s) -2.9948524 Ry(3p)

```

```

hyperfine field of Mn
-327.948 kG (core= -360.162 kG valence= 32.214 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-3.748 kG(1s) -653.064 kG(2s) 296.651 kG(3s)

```

```

charge density at the nucleus
13166.2531 (core= 13161.1903 valence= 4.9541 )
core contribution
11901.7056(1s) 1100.6241(2s) 158.8607(3s)

```

```

*** type-O      O (z= 8.0) ***
core charge in the muffin-tin sphere = 2.0000000
valence charge in the cell (spin up ) = 0.96693(s) 2.40847(p) 0.06421(d) 0.03490(f)
valence charge in the cell (spin down) = 0.96003(s) 2.40276(p) 0.03051(d) 0.01268(f)
total charge= 8.88049 valence charge (up/down)= 3.47451 3.40598
spin moment= 0.06854 orbital moment= 0.00000
orbital current (up/down)= 0.00000 0.00000

```

```

core level (spin up )
-36.6798599 Ry(1s) -0.8263606 Ry(2s)*
core level (spin down)
-36.6785382 Ry(1s) -0.8256780 Ry(2s)*

```

```

hyperfine field of O
28.365 kG (core= -1.624 kG valence= 29.989 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
-1.624 kG(1s)

```

```

charge density at the nucleus
320.3023 (core= 305.1201 valence= 15.1822 )
core contribution
305.1201(1s)

```

```

BZ-mesh regenerated
last= 964 np= 81 ngpt= 365 nrpt= 329 nk= 4004 nd= 21

```

Tc calculation starts

Molecular field on each sublattice in the assumed magnetic configuration

sublat	cmpnt	Hmf(Ry)	Hmf(meV)
1	1	0.000116	1.573165
2	1	-0.012902	-175.546700
3	1	-0.000720	-9.802539

Tc (in mean field approximation) = 8.460K

elapsed time 142.20 sec (24 threads)

OS: Linux
Host: rp

Machine: x86_64
numcor: 24

T_C の値として8.460Kが得られている。この値は J_{ij} から得られた7.116Kより1Kほど高いが、 J_{ij} を計算するレンジを大きくしていけば一致するはずのものである。

Jij 計算の出力

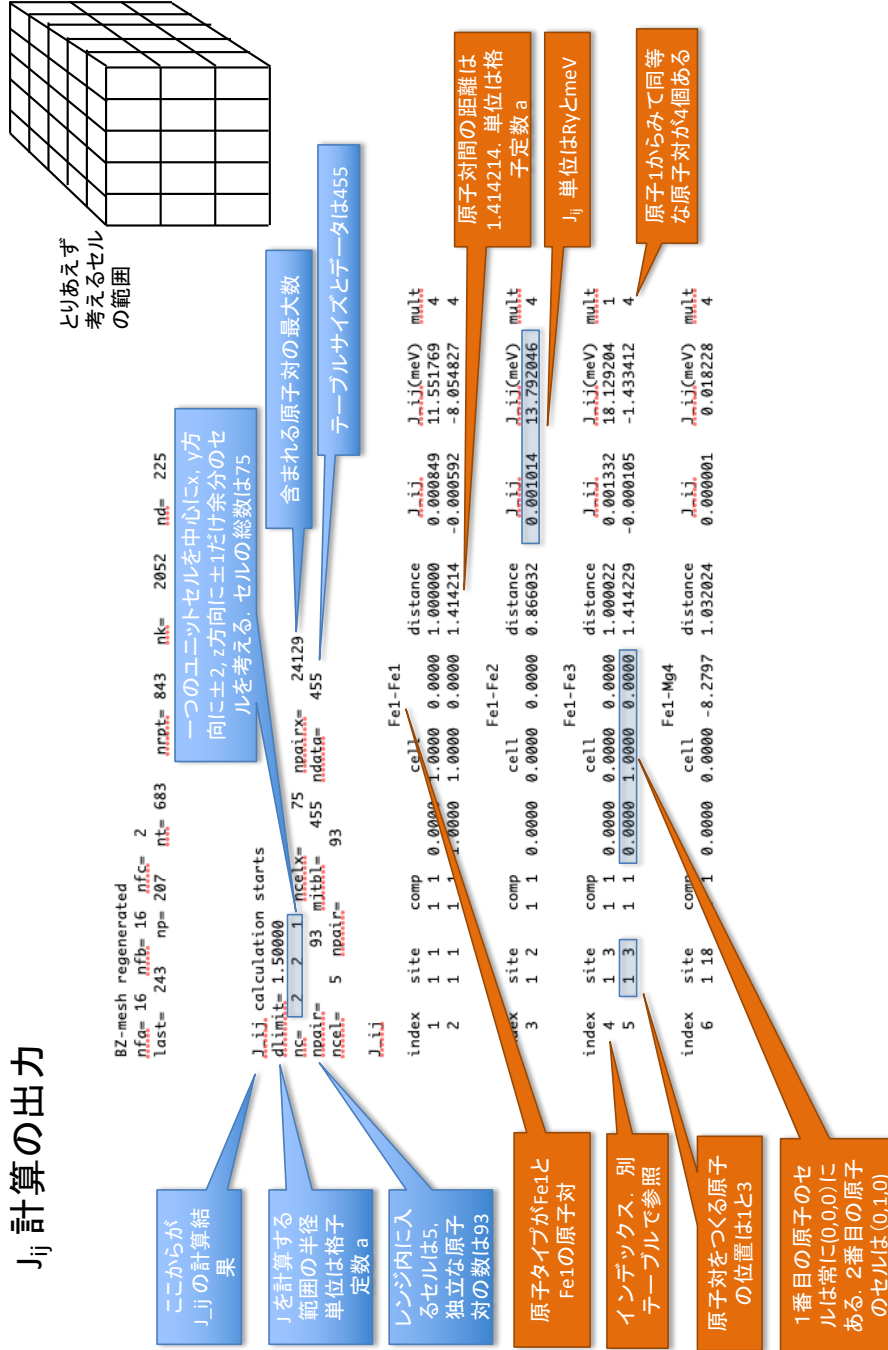


図2: J_{ij} の出力 (ブロック 1) の説明.

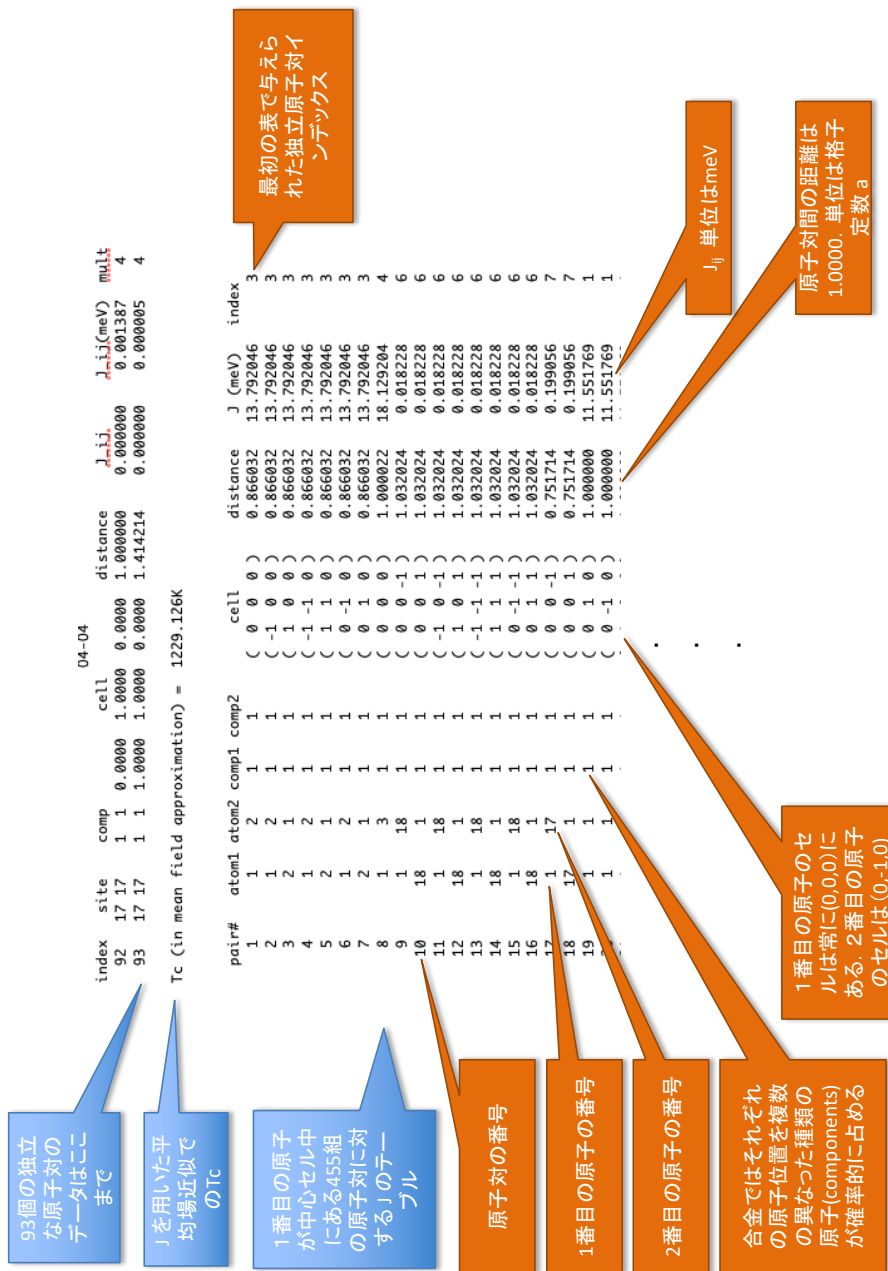


図 3: J_{ij} の出力 (ブロック 2) の説明.