BAND\_SYMMユーザーズマニュアル

目次

[1. はじめに 2](#_Toc412456871)

[2. 準備 2](#_Toc412456872)

[2.1. 解凍 2](#_Toc412456873)

[2.2. 実行ファイルband\_symmのビルド 3](#_Toc412456874)

[3. 作業の概要 4](#_Toc412456875)

[4. PHASE/0による電子状態の計算 5](#_Toc412456876)

[4.1. SCF計算 5](#_Toc412456877)

[4.2. バンド構造の計算 7](#_Toc412456878)

[5. 既約射線表現分類バンド図の作成 8](#_Toc412456879)

[5.1. 主プログラムband\_symmの実行 8](#_Toc412456880)

[5.2. band\_symm.plを用いたEPSファイルの作成 8](#_Toc412456881)

[6. 実行例 9](#_Toc412456882)

[6.1. Si2(FCC) 10](#_Toc412456883)

[6.2. GaAs(FCC) 11](#_Toc412456884)

[7. 付録 13](#_Toc412456885)

[7.1. 使用環境の詳細 13](#_Toc412456886)

[7.2. band\_symmで行う電子状態簡約計算のアルゴリズム 14](#_Toc412456887)

[7.3. spacegroup.dataの内容 15](#_Toc412456888)

[7.4. band\_symm.plで使用できるオプションの詳細 16](#_Toc412456889)

[7.5. スピン分極した系におけるバンド図の作成 18](#_Toc412456890)

[8. 制作者 20](#_Toc412456891)

参考[文献 20](#_Toc412456892)

# はじめに

BAND\_SYMMは、PHASE/0 [1]により計算した結果を、群論を用いて解析し、その状態が属する既約射線表現を特定するプログラム群です。また、本パッケージの群論解析において、空間群のプログラムであるTSPACE [2]を用いています。本マニュアルでは第2章において本パッケージを使用する上での準備について、第3章において作業の概要について、第4及び第5章において作業の詳細について、最後に第6章において、本パッケージの使用例の説明をします。本パッケージを使用する環境は、通常のUNIX環境において外部モジュールであるPHASE/0、Fortranコンパイラ、Perl、Gnuplot及びLaTeXがインストールされていることを前提とします。詳細な使用環境の説明は7.1節を御覧ください。

# 準備

本章では、本パッケージの解凍及びビルドの方法について説明を行います。

## 解凍

まず、適当なディレクトリ(以下ルートと呼ぶ)を作成し、そのディレクトリにおいて本パッケージが入ったアーカイブファイルを解凍しますと、以下のようにファイルとディレクトリが生成されます。



本パッケージに付属するファイルおよびディレクトリは以下の通りです。

1. make.inc

band\_symmを作成するためのmakefileがインクルードするファイルです。Fortranコンパイラのパスおよびオプションが記述されているので、環境に応じて変更する必要があります。

1. makefile

band\_symmを作成するためのmakefileです。こちらはmake.incのように変更する必要はありません。

1. src

band\_symmのソースファイル群を含むディレクトリです。

1. tspace

TSPACEに付属するプログラムおよびTSPACEをビルドする上でのmakefileを含むディレクトリです。

1. perl

バンド構造作図用スクリプトband\_symm.plを含むディレクトリです。

1. sample

本パッケージを用いる上での各種サンプルファイルを含むディレクトリです。

1. readme.docx

本パッケージのマニュアルです。

## 実行ファイルband\_symmのビルド

ルートでmakeコマンドを実行すれば、makefileの内容に従って本パッケージの主プログラムband\_symmをビルドすることができます。以下の図にGNUFortranを用いてband\_symmをビルドする場合の例を示します。



ビルドが完了したら、ルートに主プログラムband\_symmが作成されていることを確認してください。また、band\_symmとband\_symm.plを使用するため、パスを通してください。

GNUFortran以外でビルドする場合は、本パッケージに付属するファイルの内、make.incを書き換える必要があります。make.incの内容を下記に示しますが、コンパイラー及びリンカーの変更は、4行目におけるコンパイラのパスと、5行目におけるコンパイラオプションを書き換えることにより行います。お使いの環境に応じて変更してください。以下にmake.incの内容の一部と、Intel Fortranにおけるmake.incの変更例を示します。(行の最初における番号は、ここで説明をする上で振った行番号であり、実際のファイルには記述されておりません。)

1. make.incの一部
2. #################################################################
3. ###<< PLEASE CHANGE THE VARIABLES BELOW
4. #################################################################
5. FC = gfortran
6. FFLAG = -ffree-line-length-none
7. #################################################################
8. ###<< PLEASE CHANGE THE VARIABLES ABOVE
9. #################################################################
10. Intel Fortran用のmake.incの変更例

4 FC = ifort

5 FFLAG =

# 作業の概要

次ページに、作業の概要となるフローチャートを示します。

それぞれの作業の詳細は、以下の節を御覧ください。

(a)　PHASE/0 SCF計算 → 4.1節

(b)　PHASE/0 バンド計算 → 4.2節

(c)　band\_symm → 5.1節

(d)　band\_symm.pl → 5.2節

本作業を行う際の注意

・上記(b)において、バンド計算はPHASE/0を用いて行い、ekcalは使用しません。

・上記(d)のband\_symm.plは、これまで提供されてきたband.plとは同一機能であってもオプションの指定の仕方が異なっている場合があります　(5.2節参照)。



図 1 作業のフローチャート

# PHASE/0による電子状態の計算

次にPHASE/0を用いて結晶の電子状態を計算し、band\_symmで群論解析を行うためのインプットファイルであるkpoint.dataとband\_sym\_input.dataを用意します。

## SCF計算

電子状態の自己無撞着計算(以下SCF計算)を行うとき、インプットファイルのうち、結晶構造の入力の部分を下記のように記述します。以下は面心立方構造(FCC)をもつ結晶の計算に用いるインプットの例です。

1. structure{
2. **unit\_cell\_type = bravais**
3. unit\_cell{
4. a = 10.26
5. b = 10.26
6. c = 10.26
7. alpha = 90
8. beta = 90
9. gamma = 90
10. }
11. **symmetry{**
12. **method = automatic**
13. **tspace{**
14. **lattice\_system = facecentered**
15. }
16. }
17. atom\_list{
18. atoms{
19. #default weight = 1, mobile = 0
20. #tag element rx ry rz
21. Si 0.125 0.125 0.125
22. Si -0.125 -0.125 -0.125
23. }
24. }
25. element\_list{
26. #tag element atomicnumber
27. Si 14
28. }
29. }

注意すべき点は以下の4つです。

1. 2行目においてユニットセルをブラベ格子に設定すること
2. 4から9行目のように、ユニットセルのパラメータにブラベ格子のものを設定すること
3. 12行目において、対称性の自動決定を有効にすること
4. 14行目において、lattice\_systemを指定すること

この例はFCC結晶のものを用いているため、14行目の指定がFCCとなっています。FCC以外の指定を行う場合はPHASE/0のマニュアルをご参照ください。そのほかに関してはPHASE/0のマニュアルに従って記述してください。

## バンド構造の計算

SCF計算の後、PHASE/0を再び用いてバンド計算を行います（バンド計算はekcalを使わずPHASE/0を使って行います）。はじめに、kpoint.dataというファイルを作成し、k-pathに沿ったk点の情報を書き込みます。このファイルの作成方法はPHASE/0のマニュアルを御覧ください。

1. ﻿Control{
2. cpumax = 2 hour
3. **condition = fixed\_charge**
4. }
5. accuracy{
6. ksampling{
7. **method = file**
8. }
9. cutoff\_wf = 25.00 Rydberg
10. cutoff\_cd = 225.00 Rydberg
11. xctype = ggapbe
12. num\_bands = 12
13. ek\_convergence{
14. num\_max\_iteration = 500
15. sw\_eval\_eig\_diff = on
16. delta\_eigenvalue = 1.e-5
17. succession = 2
18. num\_extra\_bands = 2
19. }
20. }
21. Postprocessing{
22. **sw\_band\_symmetry\_analysis = ON**
23. }

以下にバンド計算を行う上でのインプットの例を示します。注意する点は以下の３つです。

1. 3行目において電荷密度を固定した計算を行うことを指定すること
2. 7行目においてkpoint.dataに記述したk点を入力する様に指定すること
3. 22行目において計算の終了後にband\_symmの入力ファイルとなる、空間群及び電子状態のデータband\_sym\_input.dataを出力するオプションをONにすること

また、ここで指定した以外のインプット内の入力、例えばバンドの数や平面波のカットオフなどについては特に制限がありませんので、PHASE/0のマニュアルに従って記述してください。

# 既約射線表現分類バンド図の作成

4章で説明した様にPHASE/0の計算を行った後、既約斜線表現（以下既約表現と呼ぶ）を表示したバンド図を作成します。実行前に、2.2節で記述したようにband\_symmとband\_symm.plを使用するため、パスを通してください。

## 主プログラムband\_symmの実行

2.2節で作成した主プログラムband\_symmを用います。このプログラムの使用方法は以下のようになります。4.2節で作成したkpoint.dataおよびband\_sym\_input.dataがあるディレクトリに移動し、以下のコマンドを実行します。また、このディレクトリを以下ワークディレクトリと呼びます。

band\_symm kpoint.data band\_sym\_input.data > spacegroup.data

band\_symmを実行した後、ワークディレクトリにreduce.dataとcharacter.texおよびspacegroup.dataが生成されたことを確認してください。このプログラムで使用するアルゴリズムに関しては、7.2節を御覧ください。

## band\_symm.plを用いたEPSファイルの作成

band\_symm.plを用いて既約表現が明記されたバンド構造を描画します。前節において取得したアウトプットの内、reduce.dataを必要とします。ワークディレクトリにおいて以下の命令を実行すると、既約表現のラベルが記述されたバンド図を描画するためのEncapsulated Post Sript(EPS)形式ファイルband\_reduce.epsが出力されます。

band\_symm.pl reduce.data

band\_symm.plはPerlエンジンの他、外部モジュールとしてGnuplotを使用していますので、Gnuplotがインストールされていないと正常にEPSファイルを作成することができません。

以下にband\_symm.plで使用できるオプションの内、よく使用されるものを示します。各オプションには、追加するパラメータとなる文字列を必要とするものと必要としないものが存在します。前者のオプションにおける各パラメータは必ずそのオプションの後ろに、1つ以上のスペースを開けて入力します。どのような文字列を入力すればよいかは各オプションの説明において後述します。また、以下のオプションを任意の順番で記述してもスクリプトは問題なく実行されます。これ以外に存在するオプションについては7.4節を御覧ください。

1. –erange MIN,MAX バンドを表示するエネルギー範囲をクリップします。MINとMAXは指定するエネルギーの最小値と最大値を示し、eV単位で設定します。このオプションを指定しない場合は、固有値の最大値と最小値から表示範囲を決定します。
2. –with\_fermi FILE フェルミ準位を指定して、そこをエネルギーの基準とします。また、エネルギー0の位置に、水平な破線を描画します。上記パラメータ“FILE”にはPHASE/0から出力された、フェルミ準位の記述されたファイル名（デフォルトのファイル名はnfefermi.data）を指定してください。このオプションを指定しない場合は、固有値のデータの基準がそのままバンド図での基準となります。また、破線は引かれません。
3. –h このスクリプトを実行する上でのヘルプが出力されます。このオプションはパラメータを必要としません。

# 実行例

本パッケージに付属するサンプルファイルを用いて、4.1、4.2、5.1及び5.2節の行程を経て作成した、Si2(FCC)およびGaAs(FCC)における既約表現分類バンドと、各k点の指標表と適合関係を示します。

1. 4.1節の行程で用いるSCF計算のインプットはそれぞれ以下にあります。

Si2：sample/Si2/SCF/nfinp.data

GaAs：sample/GaAs/SCF/nfinp.data

1. 4.2節の行程で用いるバンド計算のインプットは下記にあります。

Si2：sample/Si2/band/nfinp.data

GaAs：sample/GaAs/band/nfinp.data

1. 5.2節の行程におけるband\_symm.plの実行では、下記を指定しています。

band\_symm.pl -linecolor red –erange -14,5 –with\_fermi nfefermi.data –imrfont Helvetica,20 –ticsfont Helvetica,16　 reduce.data

オプションの詳細は5.2及び7.4節を御覧ください。

## Si2(FCC)



図 2 Si2(FCC)におけるバンド構造

## GaAs(FCC)



図 3 GaAs(FCC)におけるバンド構造



図 4 GaAs(FCC)における各k点の既約表現の指標表



図 5 GaAs(FCC)におけるk-pathの群の適合関係

# 付録

## 使用環境の詳細

本パッケージの使用には通常の32bitオペレーションシステム下におけるUNIX環境での使用を想定しております。64bitオペレーションシステム下において使用した場合、パッケージのビルド及び計算が正しく行われる保証は致しかねます。また、以下の外部モジュールが必要となります。ここでは各モジュールの概要についてのみ説明を行います。各モジュールのインストール方法についてはここでは解説いたしませんので、各モジュールに付属するユーザーズマニュアルを御覧ください。

1. PHASE/0

結晶における一電子状態を、第一原理計算の手法を用いて計算するモジュールです。このモジュールにより、band\_symmを実行する上で必要となる結晶の電子状態と空間群を記載したインプットであるband\_sym\_input.dataを作成することができます。また、群論解析の計算の上で、このモジュールに含まれる一部のソースコードを引用しております。

1. TSPACE

本パッケージの群論解析において、計算中にk群の既約表現の指標と対称操作等を取得するために必要なモジュールです。このモジュールはすでに本パッケージに組み込まれていますので、別途インストールする必要はありません。

1. Fortranコンパイラ

本パッケージに含まれるプログラムとTSPACEはすべてFortran77及びFortran90を用いて記述されております。したがって、ご使用のシステムにFortran77及びFortran90に対応したコンパイラがインストールされている必要があります。

1. Perl

バンド構造作図スクリプトであるband\_symm.plはPerlにより記述されております。したがって、ご使用のシステムにPerlエンジンがインストールされている必要があります。

1. Gnuplot

band\_symm.plの内部では、入力されたバンド構造のk-pathと各状態の固有値及び既約射線表現(以下既約表現)から、既約表現を記述したバンド構造を作図するGnuplot用のスクリプトを作成し、それをGnuplotに引き渡すといった処理を行っています。なので、ご使用のシステムにGnuplotがインストールされている必要があります。

1. LaTeX

band\_symmを実行すると、k-pathの各k点における既約表現の指標と、各k点同士の適合関係を記述したcharacter.texを取得することができます。このファイルはLaTeXの記法に従って記述してありますので、ご使用になられる場合は各自このファイルをLaTeXを用いてコンパイルすることで、閲覧可能な指標表のデータを作成することができます。

## band\_symmで行う電子状態簡約計算のアルゴリズム

結晶における電子状態は、波数空間上のベクトルに加えバンドインデックスiにより区別されます。

電子波動関数は与えられた波数ｋに対応するｋ群のいずれかの既約表現に属します。どの既約表現に属するかは、既約表現ｌに対応する射影演算子を用いて特定できます。

ここで、は群における対称操作演算子です。は群における既約表現の指標、は群の位数です。また、l’は、波動関数の属する既約表現です。上式では、波動関数のエネルギーがn重に縮退している場合を想定しています。

3. spacegroup.dataの内容

5.1節において、band\_symmの実行により出力されたspacegroup.dataには、計算した空間群における全対称操作のJones表現及び付随する並進ベクトルに加え、各k点における名前と、そのk群の点群の名前(シェーンフリース記号及び国際記号)が記述してあります。このファイルは本来はband\_symm実行時にコンソールに出力されますので、spacegroup.dataを取得したい場合はリダイレクトしてください。以下にFCC結晶におけるspacegroup.dataの例を示します。各行の右にある太字は、本文書において、spacegroup.dataの各行のデータの意味を説明するために記述したものであり、本来は出力されません。

----- WELCOME TO TSPACE V4.1 1995/09/06 ----**TSPACEから自動的に出力される文字列**

LATTICE CONSTANTS ARE SET AS

A= 10.26000 B= 10.26000 C= 10.26000 **ブラベ格子のパラメータ(a,b,c)**

CA= 0.00000 CB= 0.00000 CC= 0.00000 **ブラベ格子のパラメータ(cos(alpha),cos(beta),cos(gamma))**

#START OF SPACE GROUP　　　　　　 **空間群の情報における始まりの行**

FACE CENTERED LATTICE 　　　　　　　　**ブラベ格子の晶系の名称**

GROUP ELEMENTS

1 1 E X Y Z 0/1 0/1 0/1 **対称操作のインデックス(左から1,2番目のデータ)とTSPACE内の名称(3番目)、Jones表現(4,5,6番目)、付随する並進ベクトル(7,8,9番目)**

2 2 C2X X -Y -Z 0/1 0/1 0/1

3 3 C2Y -X Y -Z 0/1 0/1 0/1

4 4 C2Z -X -Y Z 0/1 0/1 0/1

5 5 C31+ Z X Y 0/1 0/1 0/1

**中略**

47 47 IC4Y- Z -Y -X 0/1 0/1 0/1

48 48 IC4Z- -Y X -Z 0/1 0/1 0/1

#END OF SPACE GROUP 　　　　　　　 **空間群の情報における終わりの行**

#START OF K-POINTS 　　　　　　　　**各k点の情報における始まりの行**

1 X 82 0 0 82 D4h 4/mmm 2

**k点のインデックス(左から1番目のデータ(1))とTSPACEのつけた名称(2番目のデータ(X))、整数表示された逆格子空間の座標(3,4,5,6番目のデータ(82,0,0,82)、この内3,4,5番目が座標の分子x,y,z、6番目が座標の共通分母Nとなる。K点の座標はx/N,y/N,z/Nとして表される。)、k群の名称(7,8番目のデータ、この内7番目がシェーンフリース記号(D4h)、8番目が国際記号(**4/mmm)**による表示)、k点の星の数 (9番目のデータ、この値が1のときは、このk点は第一ブリュアンゾーン(以下1stBZ)内に1つしか存在せず、1stBZの内部に存在する点であることを示す、2以上のときは、このk点と等価な点は1stBZ内に複数存在し、境界に存在する点であることを示している。)**

**中略**

117 X 0 224 0 224 D4h 4/mmm 2

#END OF K-POINTS **各k点の情報における終わりの行**

## 7.4. band\_symm.plで使用できるオプションの詳細

5.2節で説明をしなかった、band\_symm.plの各オプションについて説明します。

1. –einc VAL: 表示するエネルギーの目盛りを設定します。VALにeV単位のエネルギーを指定し、このエネルギーごとに目盛りがふられます。　　　　　　　　　　　　　　このオプションを指定しない場合は、エネルギーの最大最小値から目盛りが設定されます。
2. -imrfont TYPE,SIZE: 既約表現のラベルにおけるフォントとサイズを指定します。このフォント及びサイズはGnuplotで使用できるもののみ有効です。TYPEにフォントの名称を、SIZEにフォントのサイズを指定します。デフォルトのTYPEはHelvetica、SIZEは10です。
3. –ticsfont TYPE,SIZE: 上記imrfontオプションの軸ラベル版です。Xおよびy軸のラベルを変更します。デフォルトのTYPEはHelvetica、SIZEは10です。
4. –imrcolor COLOR: 既約表現のラベルの色を変更します。色はrgb指定で、COLOR=redもしくはCOLOR=blueなどのように設定します。2及び3のオプションにおけるフォントと同じく、この色もGnuplotで使用できるもののみ有効です。デフォルトはCOLOR=blackです。
5. –linecolor COLOR: 上記imrcolorオプションのバンド版です。バンドの線の色を変更します。デフォルトはCOLOR=blackです。
6. –imrtype TYPE: 表示する既約表現の記号の種類を指定します。TYPEには既約表現の記号の名称を指定します。TYPE=Mullikenとした場合、既約表現がMulliken記号により表示されます。(ブリュアンゾーン内部のk点に対する既約表現はMulliken記号によりあらわされますが、ブリュアンゾーン境界では、あらわされない場合があります。この場合は、番号がバンド図に記述されます。また、現在、Bethe記号、Koster記号、BSW記号等には対応しておりません）。このオプションを指定しないとき、既約表現はプログラム内で割り振った名称(以下通常表記と記す)をバンド図に記述します。通常表記と既約表現との対応はband\_symmから出力されたcharacter.texにより確認して下さい。このオプションを指定しない場合はすべての既約表現を通常表記を用いて描画します。
7. –nonecross: デフォルトでは、異なる既約表現を持つバンドは交差することを考慮してバンド図の作成を行います。ただし、うまくバンドが表示されない場合は、このオプションを指定することにより、この機能を無効化します。このオプションはパラメータを必要としません。
8. –kgrouptype TYPE: x軸に表示するk点の群の名前を指定できます。TYPE=SchoenfliesとすればSchönflies記号、TYPE=HermannMauguinとすれば国際記号を用いて群の名前がx軸に表記されます。デフォルトではSchönflies記号により描画します。

以下に実行例と、その実行例から作図したSi2(FCC)のバンド図を示します(図6)。

band\_symm.pl ./reduce.data –erange -10,15 –einc 5 –with\_fermi ./nfefermi.data -imrfont Helvetica,20 –ticsfont Helvetica,12 –imrcolor blue –linecolor red –imrtype Mulliken –kgrouptype HermannMauguin -nonecross

この実行例は以下の意味を持ちます。

* エネルギーの表示範囲を-10eVから15eVとし、エネルギーの目盛りを5eVごとに設定する
* フェルミ準位を指定し、フェルミ準位を基準としたバンド図を作成する。
* 既約表現ラベルのフォントの種類をHelvetica、サイズを20ptにし、軸ラベルのフォントの種類をHelvetica、サイズを12ptに指定する。
* 既約表現のラベルの色を青、バンドの線の色を赤に指定する。
* 既約表現の記号をMulliken表記に指定し、k点の群の記号を国際表記に指定する。
* バンド交差機能の実行は行わない。



図 6　Si2(FCC)のバンド図

## 7.5. スピン分極した系におけるバンド図の作成

スピン分極した系（サンプルインプットファイルはsample/bccFeにあります）をPHASE/0を用いて計算を行った場合、非磁性の系と同様にband\_sym\_input.dataが出力されます。これをband\_symmの実行に用いると、アップ及びダウン軌道それぞれを別々に一重表現へ簡約し、特定された既約表現のリストをreduce\_up.data及びreduce\_down.dataに出力します。これらファイルから、スピン分極した系の既約表現分類バンドを作成するには以下の二通りの方法があります。

1. reduce\_up.dataとreduce\_down.dataはそれぞれ、非磁性におけるreduce.dataと同じフォーマットをもつため、これらのファイルを別々にband\_symm.plの入力とすることで、アップスピン軌道とダウンスピン軌道の既約表現分類バンドを別々に作成することができます。

band\_symm.pl reduce\_up.data

band\_symm.pl reduce\_down.data

ただし、上記のコマンドのどちらの場合においても出力されるEPSファイルの名前はband\_reduce.epsとなりますので、これらコマンドを連続して行うと、ダウンスピン軌道についてのEPSファイルがアップスピン軌道についてのEPSファイルを上書きしてしまいます。必ず最初に行った軌道についてのEPSファイルのバックアップを取ってください。

1. 二つの軌道を同じEPSファイルに描画するには以下のコマンドを実行します。この場合、出力されるEPSファイルは一つだけとなります。

band\_symm.pl reduce\_up.data reduce\_down.data

ただし、この機能を使用して出力されたバンド図は1.の場合と比べて煩雑化しますので、1.の方法の使用を推奨します。

以下に、上記の1.の方法を用いて作成した、体心立方構造(BCC)をもつFeのスピン分極したバンドを図示します。使用したband\_symm.plのオプションは、アップスピン軌道及びダウンスピン軌道どちらの場合にも” -erange -9,26 -einc 1.0 -imrcolor blue -linecolor red -with\_fermi nfefermi.data -imrtype Mulliken”を用いました。ただし、ダウンスピン軌道の場合には加えて”-nonecross”オプションを有効にしております。



図 7 Fe(BCC)におけるアップスピンのバンド図



図 8 Fe(BCC)におけるダウンスピンのバンド図

# 制作者

本パッケージに付属するプログラムはTSPACEを除き、斎藤峯雄、冨田涼介、杉田到、大嶋寛之（以上金沢大）が作成しました。また、本マニュアルは、斎藤峯雄、冨田涼介、杉田到が執筆しました。

# 参考文献

1. PHASE: First-principles Electronic Structure Calculation Program.

(オンライン) 2014年8月現在. https://azuma.nims.go.jp/software/phase.

2. **柳瀬章.** 空間群のプログラム TSPACE. 　 : 裳華房, 1995.