

BAND_SYMM ユーザーズマニュアル

目次

1. はじめに	2
2. 準備	2
2.1. 解凍	2
2.2. 実行ファイル band_symm のビルド	3
3. 作業の概要	4
4. PHASE/0 による電子状態の計算	5
4.1. SCF 計算	5
4.2. バンド構造の計算	7
5. 既約射線表現分類バンド図の作成	8
5.1. 主プログラム band_symm の実行	8
5.2. band_symm.pl を用いた EPS ファイルの作成	8
6. 実行例	9
6.1. Si2(FCC)	10
7. 付録	12
7.1. 使用環境の詳細	12
7.2. band_symm で行う電子状態簡約計算のアルゴリズム	13
7.3. band_symm.pl で使用できるオプションの詳細	13
7.4. spacegroup.data の内容	15
7.5. スピン分極した系におけるバンド図の作成	17
7.6. スピン軌道相互作用を考慮したバンド図	19
8. 制作者	20
参考文献	20

1. 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。

2. 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。

2.1. 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。

```
[mineo@azuma band_symm]$ tar xf band_symm.tar
[mineo@azuma band_symm]$ ls
band_symm.tar  make.inc  makefile  perl  readme.docx  sample  src  tspace
```

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。

2. 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。

3. src

band_symm のソースファイル群を含むディレクトリです。

4. 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。

5. 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。

6. `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。

7. `readme.docx`

本パッケージのマニュアルです。

2.2. 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 (make) する場合の例を示します。

```
$ make
```

略

```
gfortran -std=legacy -c -ffree-line-length-none -cpp main.F90
gfortran -std=legacy -o main main.o -I. commons.o phase_commons.o tspace_defines
.o tspace_commons.o container_commons.o container_lattice.o container_psicoef.o
degeneracy.o transd_vector.o character_table.o reduce_band.o compatibility.o cla
ssification.o ../tspace/tsp98.o
mv main ../band_symm
```

略

```
$ ls
band_symm makefile make.inc perl readme.pdf src tspace
```

ビルドが完了したら、ルートに主プログラム `band_symm` (上の例で緑色) 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。)

make.inc の一部

```
1 #####
2 ###<< PLEASE CHANGE THE VARIABLES BELOW
3 #####
4 FC = gfortran -std=legacy
5 FFLAG = -ffree-line-length-none
6 #####
7 ###<< PLEASE CHANGE THE VARIABLES ABOVE
8 #####
```

3. 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)。

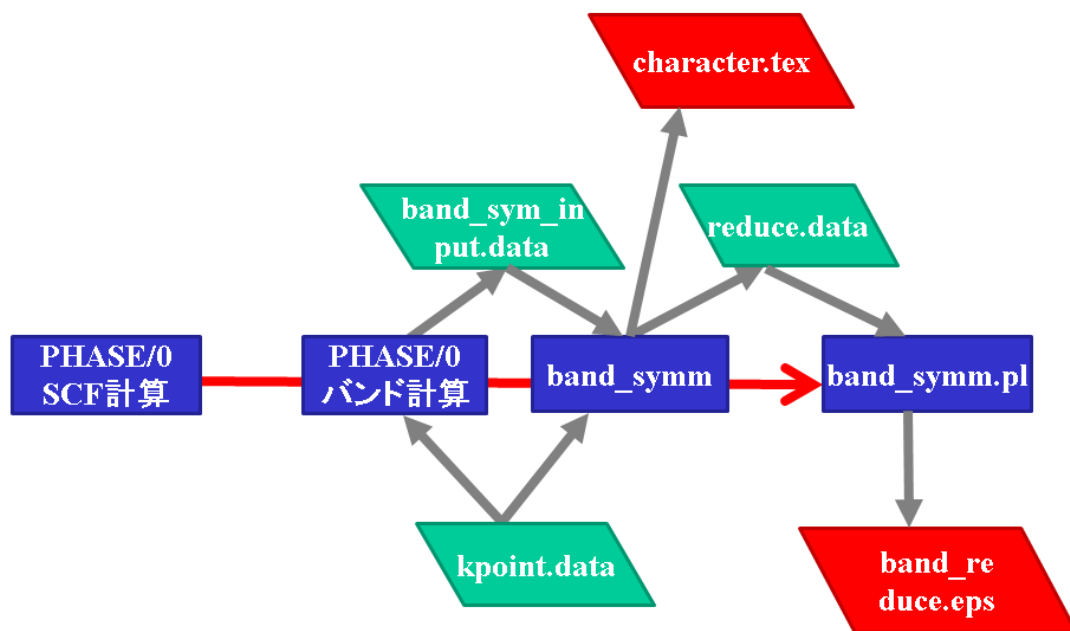


図 1 作業のフローチャート。

4. 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。

4.1. 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。

4.2. 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-7
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。

5. 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。

5.1. 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、7.23 節を御覧ください。

5.2. `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 Script (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 エンジンその他、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 7.2 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。

6. 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。
`sample/Si2/SCF/nfinp.data`
2. 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。
`sample/Si2/band/nfinp.data`
3. 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 7.3 節を御覧ください。

6.1. Si2(FCC)

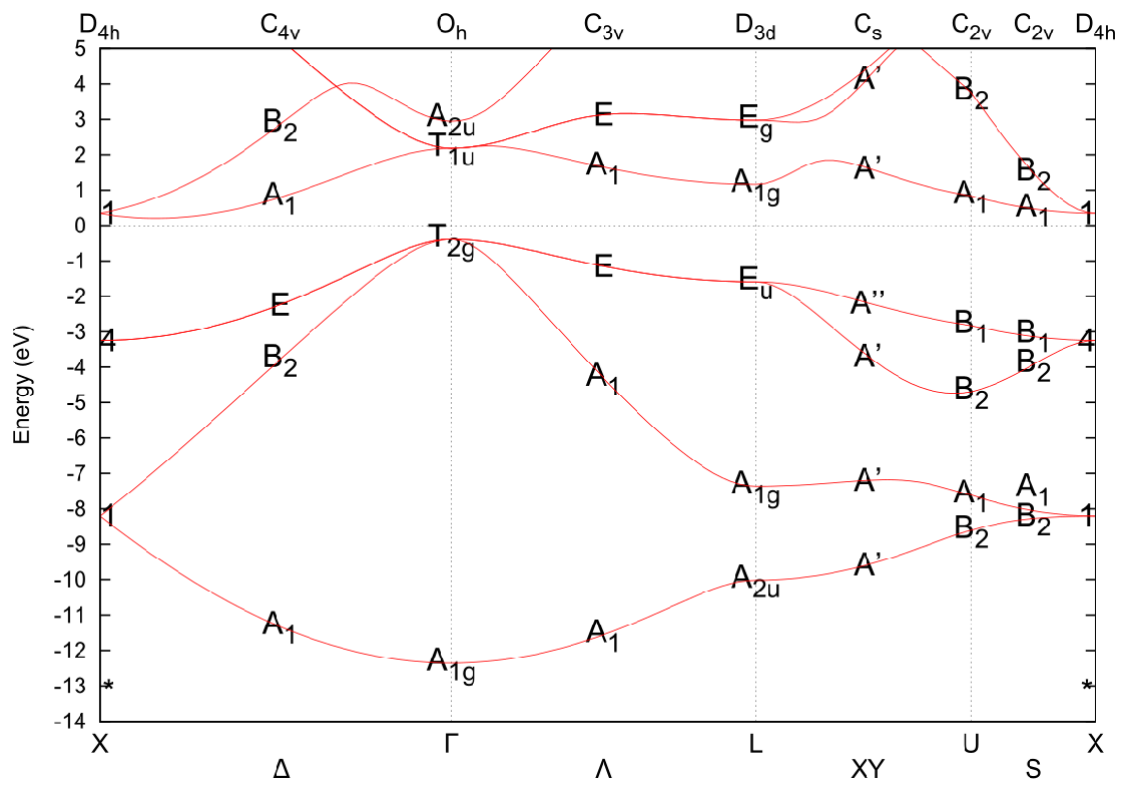


図 2 Si₂(FCC)におけるバンド構造。

$\Delta(C_{4v}, 4mm)$	E	$C2X$	$2C4X+$	$2IC2Y$	$2IC2D$
$1(A_1)$	1	1	1	1	1
$2(A_2)$	1	1	1	-1	-1
$3(B_1)$	1	1	-1	1	-1
$4(B_2)$	1	1	-1	-1	1
$5(E)$	2	-2	0	0	0

Class	Operator
E	E
C2X	C2X
2C4X+	C4X+, C4X-
2IC2Y	IC2Y, IC2Z
2IC2D	IC2D, IC2F

図 3 Si(FCC)における各 k 点の既約表現の指標表（一部のみ掲載）。既約表現は数字表記（1～5）および Mulliken 記号（括弧内）で示されます。

2 Compatibility table

		Γ	Δ	Γ	Λ				
		Γ_1^+	Δ_1	Γ_1^+	Λ_1				
		Γ_1^-	Δ_2	Γ_1^-	Λ_2				
X	Δ	Γ_2^+	Δ_3	Γ_2^+	Λ_2	L	Λ	L	XY
		Γ_2^-	Δ_4	Γ_2^-	Λ_1	L_1^+	Λ_1	L_1^+	XY_1
X_1	$\Delta_1 + \Delta_4$	Γ_3^+	$\Delta_2 + \Delta_5$	Γ_3^+	$\Lambda_2 + \Lambda_3$	L_1^-	Λ_2	L_1^-	XY_2
X_2	$\Delta_2 + \Delta_3$	Γ_3^-	$\Delta_1 + \Delta_5$	Γ_3^-	$\Lambda_1 + \Lambda_3$	L_2^+	Λ_2	L_2^+	XY_2
X_3	Δ_5	Γ_4^+	$\Delta_4 + \Delta_5$	Γ_4^+	$\Lambda_1 + \Lambda_3$	L_2^-	Λ_1	L_2^-	XY_1
X_4	Δ_5	Γ_4^-	$\Delta_3 + \Delta_5$	Γ_4^-	$\Lambda_2 + \Lambda_3$	L_3^+	Λ_3	L_3^+	$XY_1 + XY_2$
		Γ_5^+	$\Delta_1 + \Delta_3$	Γ_5^+	Λ_3	L_3^-	Λ_3	L_3^-	$XY_1 + XY_2$
		Γ_5^-	$\Delta_2 + \Delta_4$	Γ_5^-	Λ_3				
U	XY	S	U	U	S				
U_1	XY_1	S_1	U_1	U_1	S_1				
U_2	XY_2	S_2	U_2	U_2	S_2				
U_3	XY_2	S_3	U_3	U_3	S_3				
U_4	XY_1	S_4	U_4	U_4	S_4				

図 4 Si(FCC)における k -path の群の適合関係。

7. 付録

7.1. 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。

2. 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。

3. 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。

4. 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。

5. 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。

6. 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。

7.2. 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 \mathbf{k} に加えバンドインデックス i により区別されます。

$$H\psi_i^{\mathbf{k}}(r) = \varepsilon_i^{\mathbf{k}}\psi_i^{\mathbf{k}}(r)$$

電子波動関数 $\psi_i^{\mathbf{k}}$ は与えられた波数 \mathbf{k} に対応する \mathbf{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 $P_{\mathbf{k}}^l$ を用いて特定できます(文献 3 参照)。

$$P_{\mathbf{k}}^l = \frac{1}{h} \sum_R \chi_{\mathbf{k}}^l(R)^* R$$

$$\sum_i^{i+n-1} \int dr \psi_i^{\mathbf{k}}(r)^* P_{\mathbf{k}}^l \psi_i^{\mathbf{k}}(r) = \delta_{l,l'}$$

ここで、 R は \mathbf{k} 群における対称操作演算子です。 $\chi_{\mathbf{k}}^l(R)$ は \mathbf{k} 群における既約表現 l の指標、 h 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。4.2 節の入力例 16 行目で、 `delta_eigenvalue` の値を小さくすると波動関数の精度が上がり、上式の評価を正確にできます。

7.3. 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。このオプションを指定しないとき、Mulliken 記号（スピン軌道相互作用を取り入れた計算では Koster 記号）になります。TYPE を numerical にすると、プログラム内で割り振った名称(以下数字表記と記す)をバンド図に記述します。数字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（図 3 と図 9 参照）。
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 number -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。
- 既約表現の記号を数字表記にし、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。

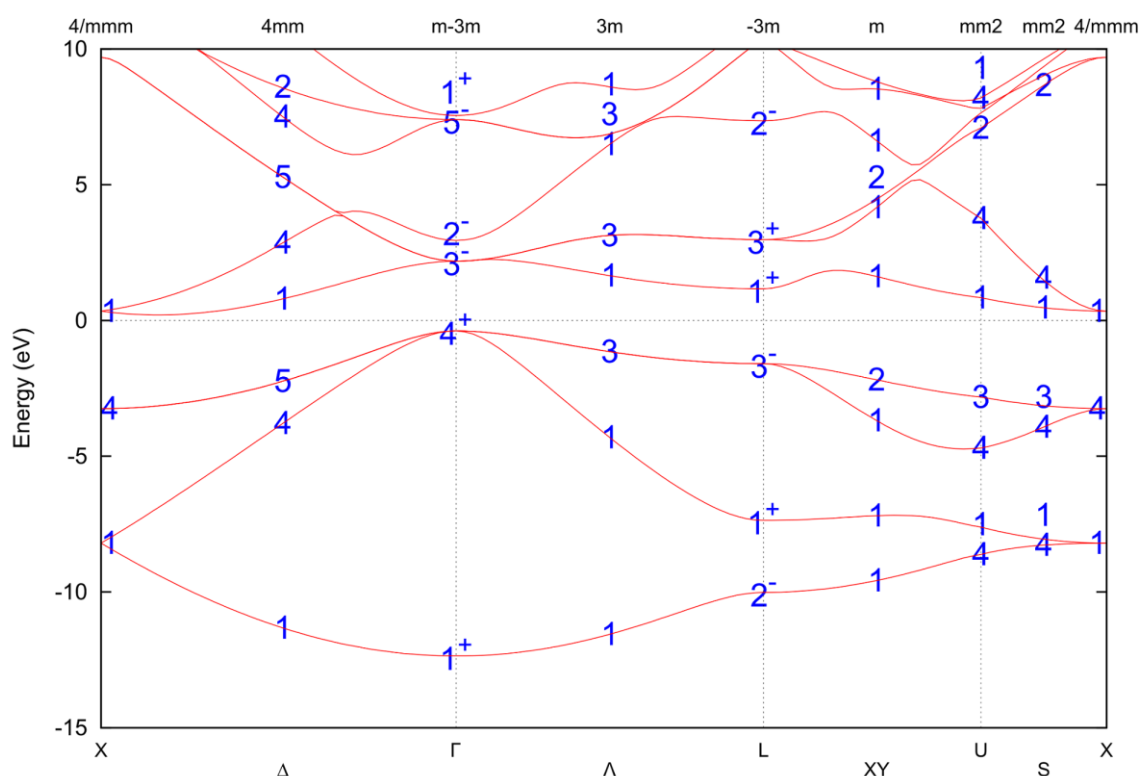


図 5 Si2(FCC)のバンド図。

7.4. 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

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くと、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。

2. 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 -imrcolor blue -linecolor red -with_fermi nfefermi.data` ”を用いました。

7.6. スピン軌道相互作用を考慮したバンド図

スピン軌道相互作用を考慮して PHASE/0 を用いて計算を行った場合（サンプルインプットファイルは `sample/bismuthene_soc` にあります）、スピン軌道相互作用を考慮しない場合と同様に、PHASE/0 を実行すると `band_sym_input.data` が出力されます。これを入力ファイルとして、`band_symm` を実行すると、`reduce_soc.data` が出力されます。

```
band_symm.pl reduce_soc.data -with_fermi nfefermi.data -erange -13,2
```

を実行すると図 8 を作成できます。既約表現は、デフォルトでは、基本的に Koster 記号に対応した形で表記されます。たとえば、 Γ 点の数字 5 は、Koster 記号 Γ_5 に対応します。これらの Koster 記号がどの Mulliken 記号に対応するかは、文献 4 をご覧下さい。図 8 において、*で示した k 点（S-C-Y 線）は Koster 記号では表せません。このような状況は、ノンシンモルフィックな系の第一ブリルアンゾーン端で生じることがあります。この場合、コンピュータが割り振った名称で表記されます。このように表記された既約表現の指標は `character.tex` の出力により確認できます（S 点に関しては図 9 参照）。D 点では、 D_3 と D_4 がペアリングし、同一のエネルギーを持ちます。ペアリングの情報は、`spacegroup.data` (5.1 節参照) に出力されます（図 10）。このペアリングの出力で現れる数字 (1, 2) は、指標表（図 9）に現れる既約表現の順番になりそれぞれ D_3 と D_4 に対応します。同様に、S 点では S_1 と S_2 及び S_3 と S_4 がペアリングします（図 9, 10 を参照）。

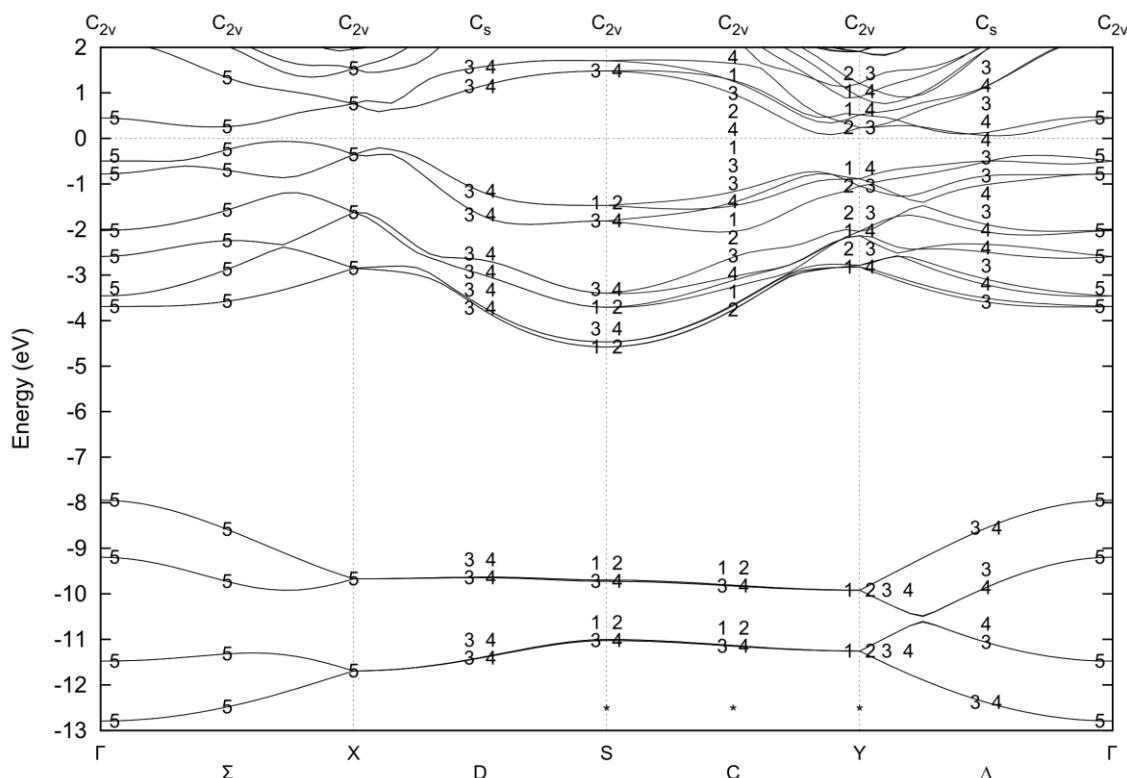


図 8 α ビスマセンのバンド図（スピン軌道相互作用を考慮）

$D(C_s, m)$	E	$IC2Z$	Class	Operator
1(3)	1	$-i$	E	E
2(4)	1	i	IC2Z	IC2Z

$S(C_{2v}, mm2)$	E	$C2X$	$IC2Y$	$IC2Z$	Class	Operator
1	1	1	$-i$	$-i$	E	E
2	1	1	i	i	C2X	C2X
3	1	-1	$-i$	i	IC2Y	IC2Y
4	1	-1	i	$-i$	IC2Z	IC2Z

図 9 指標表 (D 点と S 点)。D 点の指標表で括弧内の数字 3, 4 はそれぞれ Koster 記号 D_3 と D_4 に対応します。S 点の既約表現に対応する Koster 記号はありません(図 8 のバンド図では、S 点の上に*が現れます)。

20 D	40 2 0 80 Cs	m	2			
	PAIRING of	1 and	2 :	Herring sum=	0	
	PAIRING of	2 and	1 :	Herring sum=	0	

39 S	40 40 0 80 C2v	mm2	4			
	PAIRING of	1 and	2 :	Herring sum=	0	
	PAIRING of	2 and	1 :	Herring sum=	0	
	PAIRING of	3 and	4 :	Herring sum=	0	
	PAIRING of	4 and	3 :	Herring sum=	0	

図 10 spacegroup.data の一部。

8. 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、富田涼介、杉田到、大嶋寛之、Thomas Arisoca、Muhammad Y. H. Widiyanto、山口 悠樹 (以上金沢大) が作成しました。

参考文献

1. T. Yamasaki, A. Kuroda, T. Kato, J. Nara, J. Koga, T. Uda, K.

- Minami, T. Ohno, *Comput. Phys. Commun.* 244 (2019) 264–276.
2. 柳瀬章. 空間群のプログラム TSPACE. : 裳華房, 1995.
3. S. A. Putri, Y. Yamaguchi, T. A. Ariasoca, M. Y. H. Widiyanto, K. Tagami, M. Saito, *Surf. Sci.* 714 (2021) 121917.
4. T. Inui, Y. Tanabe, Y. Onodera, *Group Theory and Its Applications in Physics*, Springer-Verlag, Tokyo, 1990.