

Fermi Surfer マニュアル

version 1.2

東京大学 河村光晶

目次

- 1, はじめに
- 2, インストール手順
- 3, input file 書式
- 4, 標準出力の説明、操作方法
- 5, ギャラリー

1, はじめに

この文書では Fermi 面描画ソフト「Fermi Surfer」についての解説を行っています。Fermi Surfer は東京大学の河村光晶が 2012 年頃から開発を行っていたもので、2014 年 11 月に公開されました。Fermi 面を描画しその上に各種物理量(超伝導ギャップ関数や軌道キャラクターなど)をカラープロットするソフトウェアです。

2, インストール手順

要件

- ・ C コンパイラ(gcc, intel, PGI, 富士通コンパイラ等)
- ・ GLUT 環境(libfreeglut.a libGL.a libGLU.a freeglut.h というファイルが必要)

(1) Linux の場合

必要なパッケージをインストール(既にパッケージが入っている場合は何も起こりません。)

- ・ Debian/Ubuntu 等

```
$ sudo aptitude install freeglut3-dev
```

- ・ Red Hat Enterprise Linux/CentOS 等

```
$ sudo yum install freeglut-devel.x86_64
```

コンパイル(gcc の場合)

```
$ gcc fermisurfer.c -O3 -lglut -lGLU -lGL -o fermisurfer
```

以上で実行可能ファイル fermisurfer が作られます。

3、入力データファイルの書式

用意するデータは、

- ・ Brillouin 領域分割数(3 方向)
 - ・ 逆格子ベクトル
 - ・ バンド本数
 - ・ 軌道固有値(以下エネルギーと呼びます)の各バンド、k グリッド点での値
 - ・ カラープロットしたい物理量(以下物理量と呼びます)の各バンド、k グリッド点での値
- です。

※ k グリッドの取り方

k 点の取り方として、 Γ 点を含むグリッドと、 Γ 点から半グリッド分だけずらしたグリッドの二つに対応しています(図 1)。後者はプロットしたい物理量が Γ 点で特異的になっている場合等に用いられる事を想定しています。

上記データを次のとおりの書式で並べます(サンプルファイル mgb2_vfz.fs の中身)。

```
      40          40          36          k グリッド数
      0           $\Gamma$ 点を含むグリッド (含まないグリッドでは 1 とする)
      3          バンド本数
1.00000000    0.57735026    -0.00000000    逆格子ベクトル 1 (任意単位)
0.00000000    1.1547005     0.00000000    逆格子ベクトル 2
0.00000000   -0.00000000    0.87206507    逆格子ベクトル 3
2.91340202E-02  エネルギー (並び順は下記参照)
2.93242838E-02
2.98905596E-02
3.08193434E-02
      :
      :
0.14393796
0.12800488
0.00000000    物理量 (並び順は下記参照)
0.36269817
0.71675694
1.0535113
1.3644149
      :
      :
-26.409407
-19.318560
-10.315671
```

C、fortran での入力ファイルの書き出し方

以下変数

- bvec1, bvec2, bvec3 . . . 逆格子ベクトル
 - nk1, nk2, nk3 . . . 各逆格子ベクトルの方向の分割数
 - isitch . . . 0 or 1。グリッドをシフトさせるか否か
 - nbnd . . . バンド数
 - eig . . . エネルギー
 - x . . . 物理量
- とする。

・ fortran

```
open(fo, file = "sample.fs" )
write(fo,*) nk1, nk2, nk3
write(fo,*) iswitch
write(fo,*) nbnd
write(fo,*) real(bvec1(1:3))
```

```

write(fo,*) real(bvec2(1:3))
write(fo,*) real(bvec3(1:3))
do ibnd = 1, nbnd
  do ik1 = 1, nk1
    do ik2 = 1, nk2
      do ik3 = 1, nk3
        write(fo,*) real(eig(ik3, ik2, ik1, ibnd))
      end do
    end do
  end do
end do
do ibnd = 1, nbnd
  do ik1 = 1, nk1
    do ik2 = 1, nk2
      do ik3 = 1, nk3
        write(fo,*) real(x(ik3, ik2, ik1, ibnd))
      end do
    end do
  end do
end do
close(fo)

```

・ C 言語

```

fo = fopen( "sample.fs", "w" );
ierr = fprintf(fo, "%d %d %d", nk1, nk2, nk3);
ierr = fprintf(fo, "%d, iswitch);
ierr = fprintf(fo, "%d, nbnd);
ierr = fprintf(fp, "%e %e %e", bvec1[0], bvec1[1], bvec1[2]);
ierr = fprintf(fp, "%e %e %e", bvec2[0], bvec2[1], bvec2[2]);
ierr = fprintf(fp, "%e %e %e", bvec3[0], bvec3[1], bvec3[2]);
for (ibnd = 0; ibnd < nbnd; ++ibnd) {
  for (ik1 = 0; ik1 < nk1; ++ik1) {
    for (ik2 = 0; ik2 < nk2; ++ik2) {
      for (ik3 = 0; ik3 < nk3; ++ik3) {
        ierr = fprintf(fo, "%e", eig[ibnd][ik1][ik2][ik3]);
      }
    }
  }
}
for (ibnd = 0; ibnd < nbnd; ++ibnd) {
  for (ik1 = 0; ik1 < nk1; ++ik1) {
    for (ik2 = 0; ik2 < nk2; ++ik2) {
      for (ik3 = 0; ik3 < nk3; ++ik3) {
        ierr = fprintf(fo, "%e", x[ibnd][ik1][ik2][ik3]);
      }
    }
  }
}
fclose(fo);

```

4, 標準出力の説明、操作方法

作成した実行可能ファイル fermisurfer にパスが通っている状態で。

```
$ fermisurfer mgb2_vfz.fs
```

とコマンド、スペース、入力ファイル名とタイプします。(サンプルファイルの中身は MgB₂ の Fermi 速度の z 方向成分です。)

その後ファイルから読み取った情報が出力されます。

```
##### Brillouin zone informations #####
```

```
k point grid : 40 40 36
k point grid is not shifted
# of bands : 3
bvec 1 : 1.000000 0.577350 -0.000000
bvec 2 : 0.000000 1.154701 0.000000
bvec 3 : 0.000000 -0.000000 0.872065
```

また、描画するときの様々な情報も出力されます。

```
# of lines for BZ : 84          Brillouin 領域の境界を表示する線の数
```

```
##### Max. and Min. of each bands #####
```

それぞれのバンドにおけるエネルギーと物理量の最小値・最大値

Band	Eig_Min	Eig_Max	Mat_Min	Mat_Max
1	-0.428153	0.056262	-24.048639	24.048639
2	-0.289572	0.121181	-23.320309	23.320309
3	-0.133566	0.497620	-43.651634	43.651634

```
##### First Brillouin zone mode #####
```

```
band # of patches
1      8824
2     29469
3     28315
```

それぞれのバンドにおけるパッチ(Fermi 面を構成する平面)の数

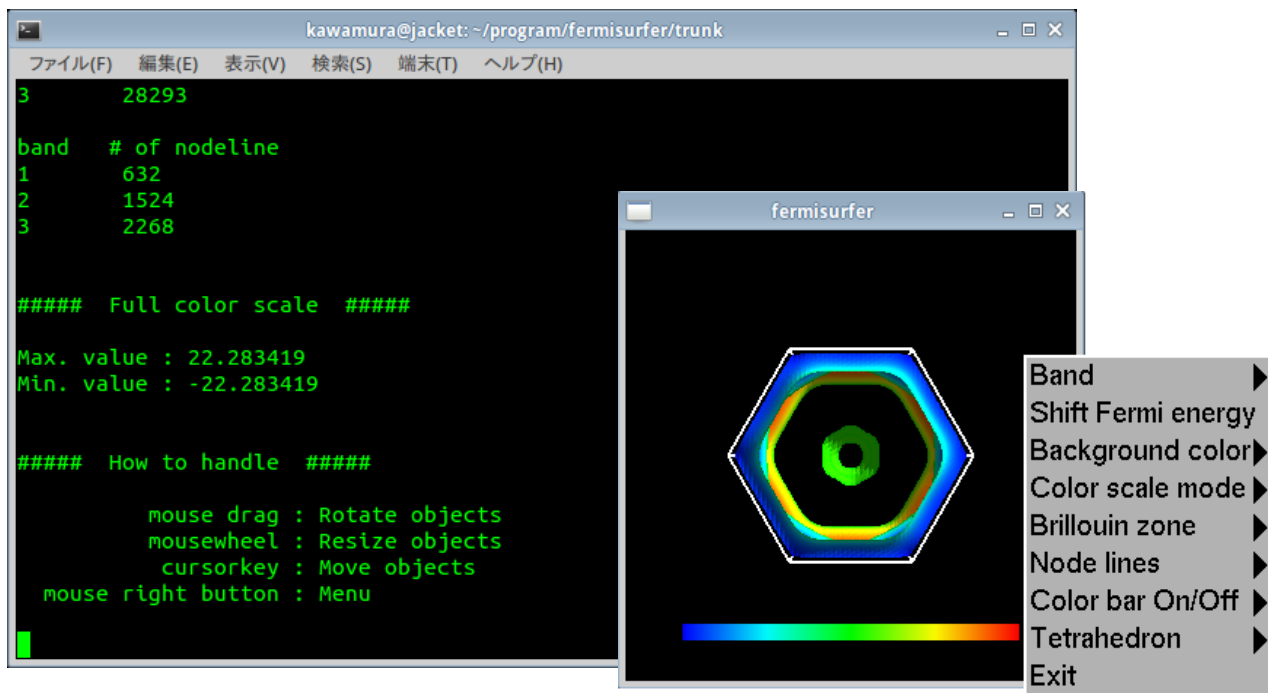
```
band # of nodeline
1      632
2     1524
3     2268
```

それぞれのバンドにおける node line(後述)の本数

```
##### Full color scale #####
```

Max. value : 22.283419 物理量の Fermi 面における最大値と最小値です。
Min. value : -22.283419 前に表示されているのは Brillouin 領域全体のものです。
この数字がカラーバーの最大・最小に対応します。下の例では一番青いところが -22.283419、一番赤いところが 22.283419 となります。

次に操作方法が出力され、Fermi 面が描画されます。



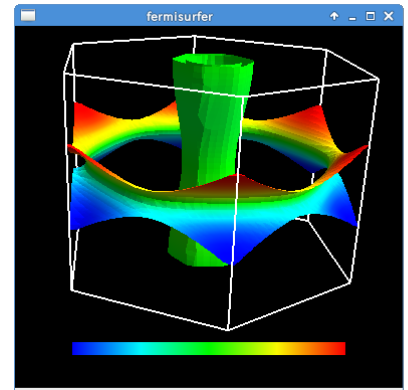
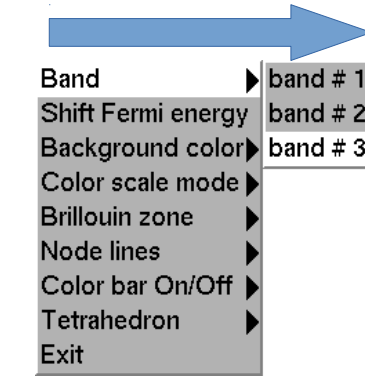
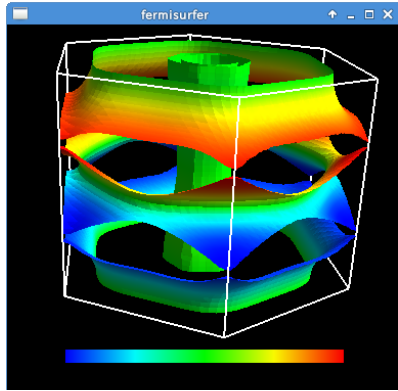
- ・ マウスのドラッグによる回転が出来ます。
- ・ マウスのホイールを使っての拡大・縮小が出来ます。
- ・ ウィンドウの大きさを変えることも出来ます。
- ・ カーソルキーを使ってウィンドウ内で上下左右に図を動かせます。
- ・ ウィンドウ内でマウスの右クリックをするとメニューが表示されます。

メニューの説明

・ Band メニュー

バンド毎の表示 on/off を切り替えます

標準出力
Band 3 : Off

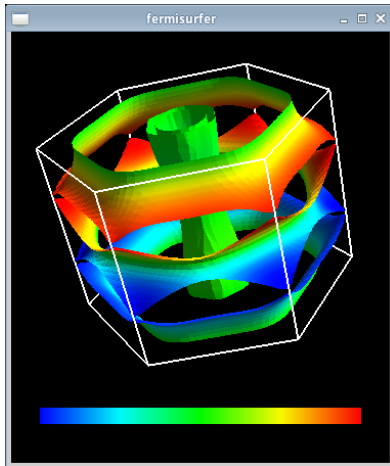


標準出力
Band 3 : On

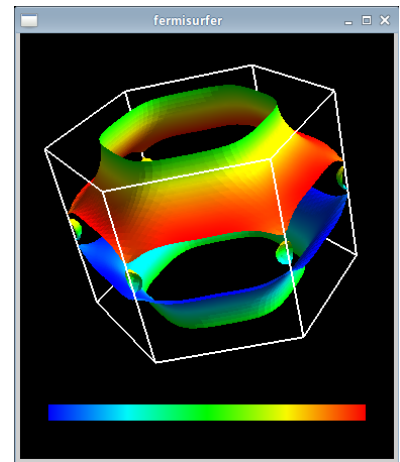
・ Shift Fermi energy メニュー

Fermi エネルギー(デフォルトでは0)を任意の値にずらします。このメニューを選択すると次のようにインプット中の最小のエネルギー、最大のエネルギー、現在の Fermi エネルギーが標準出力として表示され、次に新しい Fermi エネルギーを入力できるようになります。

Min Max E_F
-0.428153 0.497620 0.000000
Fermi energy shift :

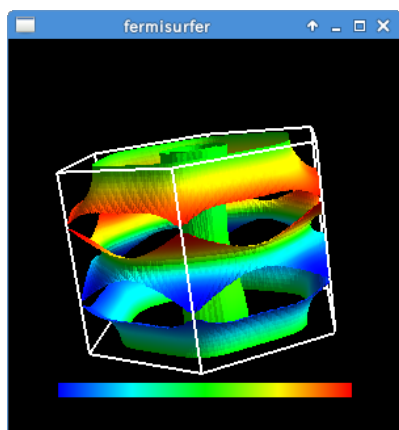


Fermi エネルギーを
0.1 と指定する

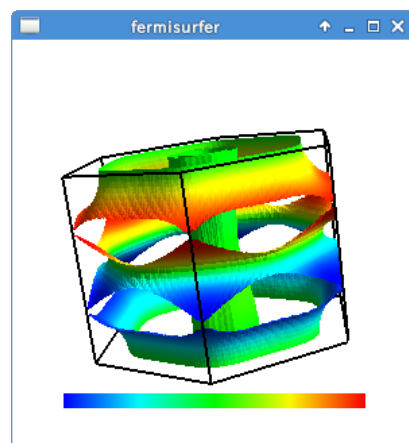


・ Background color メニュー

背景色を黒または白に切り替えます。Brillouin Zone の枠線も白/黒と切り替わります。



- Band ▶
- Shift Fermi energy ▶
- Background color ▶ Black
- Color scale mode ▶ White
- Brillouin zone ▶
- Node lines ▶
- Color bar On/Off ▶
- Tetrahedron ▶
- Exit ▶

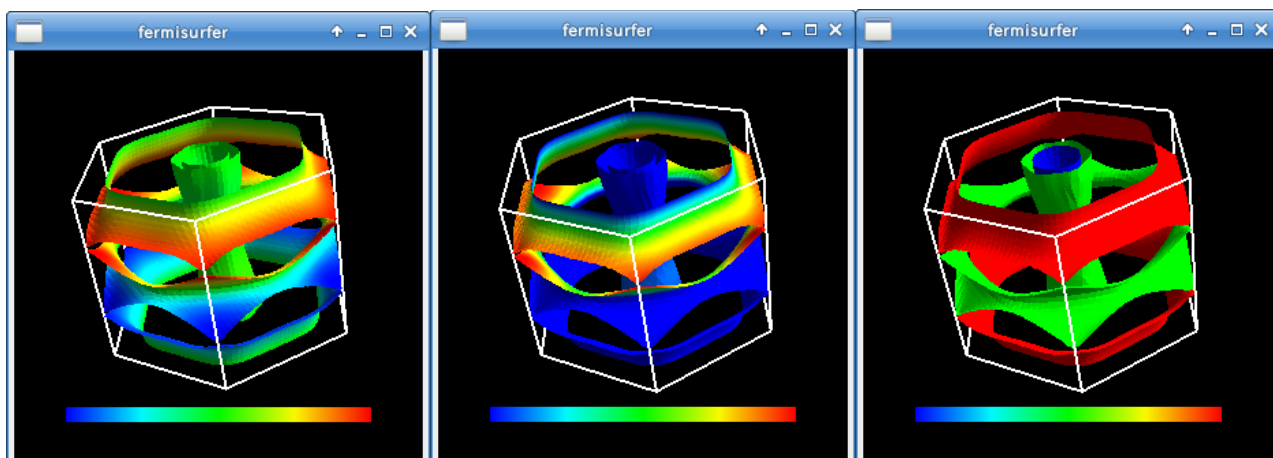


・ Color scale mode メニュー

Auto (デフォルト)・・・カラースケールの範囲を Fermi 面上での物理量の最小値から最大値までとします。

Manual・・・カラースケールの範囲を標準入力から設定します。

Unicolor・・・物理量に関係なく、各バンド毎に単色で Fermi 面を塗ります。



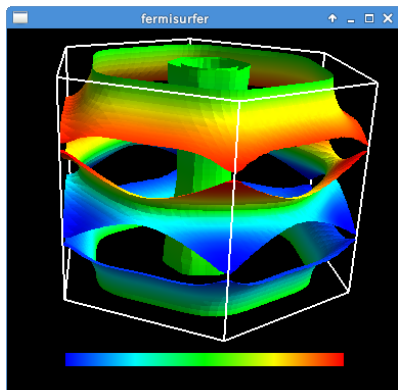
Auto
Min=-22.283419
Max=22.283419
と自動設定。

Manual で
Min=0
Max=22.283419
と設定した場合。

Unicolor

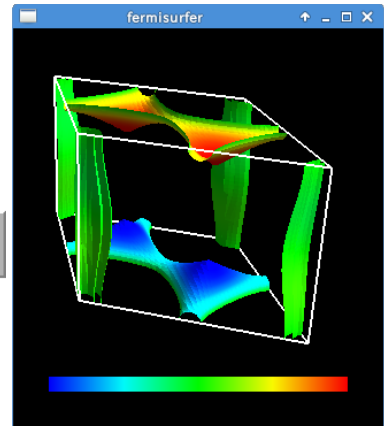
・ Brillouin zone メニュー

描画範囲を First Brillouin Zone/Primitive Brillouin Zone と切り替える事が出来ます。
 First Brillouin Zone : Γ 点から一番近い Bragg 面で囲まれた領域
 Primitive Brillouin Zone : 逆格子ベクトルを辺とする平行六面体領域



First Brillouin Zone mode

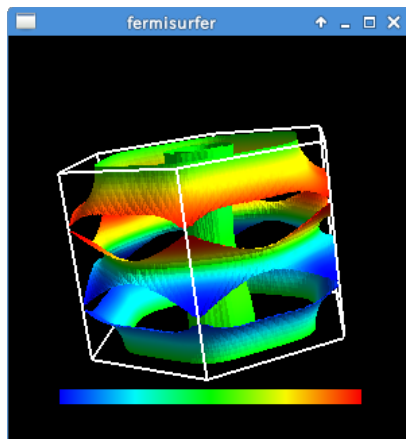
- Band ▶
 - Shift Fermi energy ▶
 - Background color ▶
 - Color scale mode ▶
 - Brillouin zone ▶
 - Node lines ▶
 - Color bar On/Off ▶
 - Tetrahedron ▶
 - Exit ▶
- First Brillouin zone
 - Primitive Brillouin zone



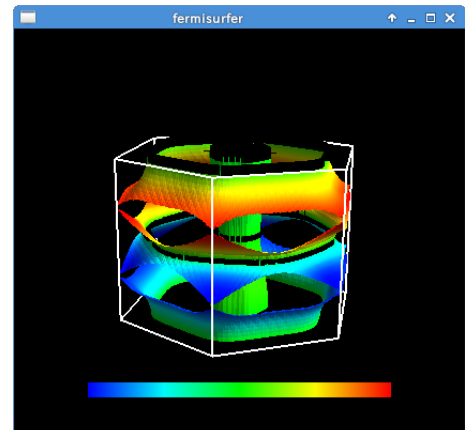
Primitive Brillouin Zone mode

・ Node line メニュー

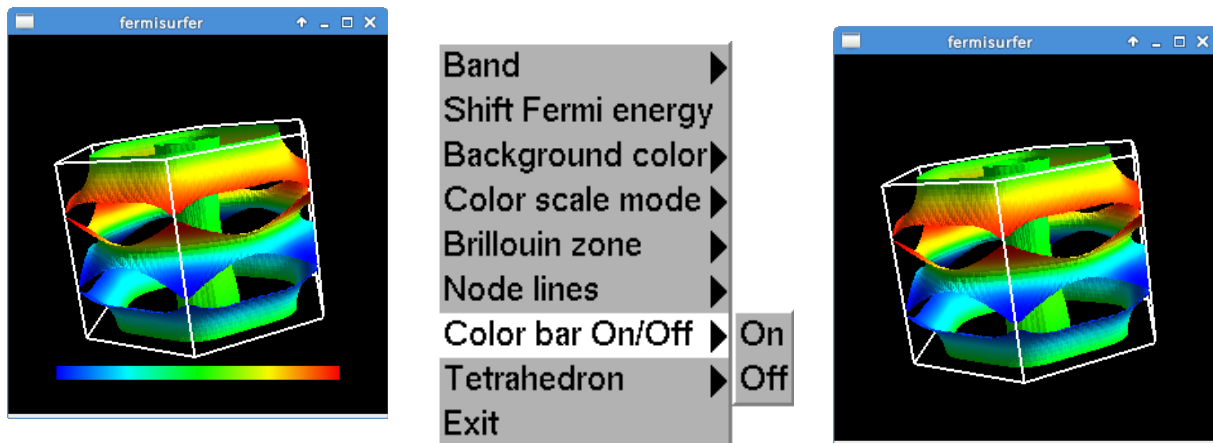
物理量が 0 となる場所に引く線 (node line) の On/Off を切り替えます。



- Band ▶
 - Shift Fermi energy ▶
 - Background color ▶
 - Color scale mode ▶
 - Brillouin zone ▶
 - Node lines ▶
 - Color bar On/Off ▶
 - Tetrahedron ▶
 - Exit ▶
- On
 - Off

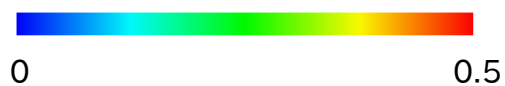
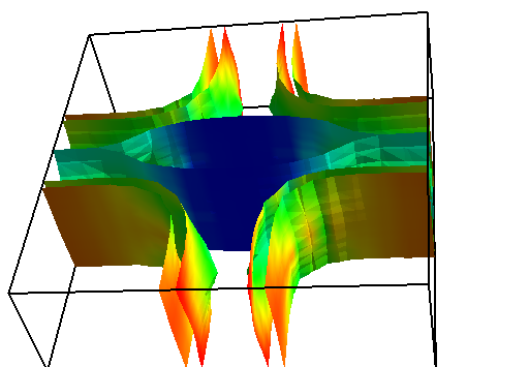


- ・ **Color bar On/Off メニュー**
カラーバーの表示/非表示を切り替えます。

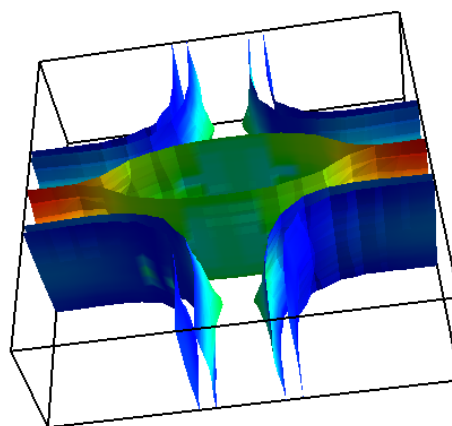


- ・ **Tetrahedron メニュー**
四面体の切り方を変えます (デフォルトは tetra # 1)。図が綺麗になる可能性があります、多くの場合は逆に図がギザギザして汚くなるようです。
- ・ **Exit**
fermisurfer を終了します。

ギャラリー



YBa₂Cu₃O₇ の $d_{x^2-y^2}$ 軌道成分



YBa₂Cu₃O₇ の d_{z^2} 軌道成分