UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

INSTITUT ZA FIZIKU

IZRAČUNAVANJE ZONSKE STRUKTURE "LINEAR MUFFIN-TIN ORBITALS" (LMTO) METODOM

(Diplomski rad)

BULETINAC KATA

NOVI SAD, 1988.

Ovaj rad je izrađen u Laboratoriji za teorijsku fiziku Instituta "Boris Kidrič" u Vinči, pod rukovodstvom Vukajlović dr Filipa i u Laboratoriji za teorijsku fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu, pod rukovodstvom Kapor dr Darka.

Zahvaljujem Kapor dr Darku i Kapor dr Agneš na podršci i pomoći koju su mi pružali tokom studija.

SADRŽAJ:

U ovom radu se koristi atomski sistem jedinica u kome važi:

$$\hbar = 2m = \frac{e^2}{2} = 1,$$

a jedinica za energiju je 1Ry = 13.6049 eV (energija jonizacije atoma vodonika).

1. UVOD

Predmet proučavanja ovog rada je određivanje elektronske zonske strukture kristala. Prvi pokušaji njenog određivanja pojavili su se već nakon zasnivanja kvantne mehanike i kvalitativno dokazivanje postojanja zona preko Schrödinger-ove jednačine je bio jedan od njenih uspeha, ali se dugo nije dobila kvantitativna teorija.

Bilo je potrebno da prođe više od pola veka da bi se razvile teorije elektronske strukture kakve danas imamo. U tom razdoblju, sve vreme se preplitao razvoj teorije i eksperimentalnih mogućnosti. Dobijani su sve čistiji monokristali, niže temperature, viši pritisci, jača magnetna polja... Razvoj računara danas nam je omogućio računanje zonske strukture sa velikom tačnošću za većinu poznatih kristala. Mogu se čak ispitivati osobine još nesintetizovanih materijala pa tako, i bez eksperimenta, predviđati mogućnosti njihove primene.

Treba naglasiti da se fizika čvrstog stanja dugo razvijala nezavisno od napora usmerenih ka izračunavanju korektne zonske strukture. Pri tome su se, za opisivanje elektronskog sistema, koristili efektivni hamiltonijani sa izvesnim brojem parametara. Izborom određenih vrednosti ovih parametara, opisivane su fizičke osobine konkretnih materijala. U poslednje vreme se radi na ujedinjenju pristupa zasnovanog na konstrukciji efektivnog hamiltonijana i zonskog prilaza. Tako se, zahvaljujući razvoju mnogočestičnih teorija, pojavljuje mogućnost tačnijeg određivanja efektivnog kristalnog potencijala, a prilikom određivanja vrednosti parametara efektivnog hamiltonijana, koriste se rezultati izračunavanja zonske strukture datih materijala.

Za rešavanje problema elektronske strukture kristala, zbog izuzetno velikog broja interagujućih čestica, potrebno je uvesti niz aproksimacija. Velika razlika u masama elektrona i jona od kojih je izgrađena kristalna rešetka, omogućava nam uvođenje Born-Oppenhaimer-ove aproksimacije [1]. Zatim se uvodi model nezavisnih elektrona (jednočestični model), po kome se elektron kreće nezavisno od drugih elektrona u samo-usaglašenom (self-konzistentnom) potencijalu $v(\vec{r})$, koji opisuje interakciju elektrona sa jezgrima i usrednjenu interakciju sa drugim elektronima. Tako se složeni mnogočestični problem sveo na rešavanje Schrödinger-ove jednačine oblika $(-\nabla^2 + v(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$. Dva osnovna problema pri rešavanju ove jednačine su kako izabrati potencijal $v(\vec{r})$ i kakav oblik pretpostaviti za talasnu funkciju $\psi(\vec{r})$. Iterativnim postupkom, modifikujući $v(\vec{r})$ u svakom koraku prema rezultatima prethodnog koraka, može se postići dobar stepen usaglašenosti između potencijala $v(\vec{r})$ i talasne funkcije. Takve procedure zahtevaju glomazna računanja koja dugo nisu bila izvodljiva, a u svakom je potreban što realniji potencijal, takav da iteracije budu konvergentne i brze.

Translaciona invarijantnost kristalnog potencijala omogućava nam da izračunavanje zonske strukture svedemo na rešavanje Schrödinger-ove jednačine samo unutar primitivne ćelije realnog, odnosno inverznog prostora. Ta se rešenja spajaju na granicama atomskih poliedara, tako da budu neprekidna i diferencijabilna, čime se dobijaju komplikovani granični uslovi. Slater 1937. [2] uvodi "muffin-tin" (MT) sferu koju upisuje u svaki atomski poliedar, čime uveliko uprošćava granične uslove.

Pri izračunavanju zonske strukture "linear muffin-tin orbitals" (LMTO) metodom, za rešavanje jednočestične Schrödinger-ove jednačine koristi se MT potencijal koji je sferno simetričan unutar sfera, a u intersticijalnoj oblasti između sfera ima konstantnu vrednost. Talasne funkcije su linearne kombinacije energetski nezavisnih MT orbitala. Počeci razvoja ovog metoda mogu se naći u radovima Andersena [3] iz 1971. godine.

Prve primene LMTO metoda u stvarnim izračunavanjima zonske strukture pojavile su se 1975. u radovima Jepsen-a [4] [5]. Njegovi su rezultati govorili da je tačnost ovog metoda uporediva sa tačnošću ostalih metoda, a vreme računanja je za red veličine manje nego kod drugih. Ovo je učinilo LMTO metod najviše primenjivanim za izračunavanje zonske strukture i najpogodnijim za primenu u našim uslovima.

Cilj ovog rada je proučavanje LMTO metoda u aproksimaciji atomskih sfera (ASA), koji nam je posebno zanimljiv zbog osobine da se može razdvojiti na dva nezavisna dela - strukturni i potencijalni. U radu ćemo ispitivati osobine strukturnih konstanti, koje su nosioci informacija o uticaju konkretne strukture kristala na zonsku strukturu i baviti se njihovim izračunavanjem. Formiraćemo datoteku podataka za proučavanu strukturu, tako da će se podaci iz nje moći koristiti u svim daljim primenama LMTO metoda u ASA.

2. SCHRODINGER-OVA JEDNAČINA ZA KRISTAL

2.1. Samousaglašeno rešavanje Schrödinger-ove jednačine za kristal

Izračunati zonsku strukturu znači pronaći rešenja mnogočestične Schrödinger-ove jednačine koja opisuje ponašanje M elektrona u polju N jezgara:

$$\hat{H}\,\Phi\,(\vec{R}_1,\vec{R}_2,\ldots,\vec{R}_N,\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots\vec{r}_M) = E\,\Phi\,(\vec{R}_1,\ldots,\vec{R}_N,\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_M). \tag{2.1}$$

Hamiltonijan ovog problema dat je izrazom:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\hat{T}^{J}_{\vec{R}_i} + \sum_{j=1}^{M}\hat{T}^{e}_{\vec{r}_j} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{i'=1}^{i-1}V^{JJ}(\vec{R}_i-\vec{R}_{i'}) + \sum_{j=1}^{M}\sum_{j'=1}^{j-1}V^{ee}(\vec{r}_j-\vec{r}_{j'})+$$

$$+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}V^{eJ}\,(\vec{r}_j-\vec{R}_i). \tag{2.2}$$

Ovde smo sa $\vec{r}_j$ i $\vec{R}_i$ obeležili koordinate elektrona i jezgara, respektivno. $\hat{T}^{J}_{\vec{R}_i}$ je operator kinetičke energije jezgara, $\hat{T}^{e}_{\vec{r}_j}$ je operator kinetičke energije elektrona, V^{JJ} opisuje interakciju između jezgara, V^{ee} opisuju interakcije između elektrona, a član V^{eJ} interakcije tipa elektron-jezgro.

Elektroni, zbog mnogo manje mase od mase jezgara veoma brzo prate promenu konfiguracije jezgara. Ovo nam omogućava da posmatramo elektronsku strukturu sistema za nepromenljivu konfiguraciju jezgara, što je osnovna ideja Born - Oppenheimer-ove aproksimacije [1]. Tada se prethodni problem svodi na mnogoelektronsku Schrödinger-ovu jednačinu za datu konfiguraciju jezgara:

$$\hat{H}_{el}\,\psi_{\vec{R}_1,\ldots,\vec{R}_N}(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_M) = E^{el}_{\vec{R}_1,\ldots,\vec{R}_N}\,\psi_{\vec{R}_1,\ldots,\vec{R}_N}\,(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_M) \tag{2.3}$$

$$\hat{H}_{el} = \sum_{j=1}^{M} \hat{T}^{e}_{\vec{r}_j} + \sum_{j=1}^{M} \sum_{j'=1}^{j-1} V^{ee} (\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}) + \sum_{j=1}^{M} V_{ext} (\vec{r}_j) \qquad (2.4)$$

$$\dot{V}_{ext} (\vec{r}_j) = \sum_{i=1}^{N} V^{eJ} (\vec{r}_j - \vec{R}_i) \qquad (2.5)$$

Iako daleko prostiji problem od predhodnog, i ovaj problem zahteva opisivanje ponašanja velikog broja interagujućih čestica ($M \sim 10^{24}$). Ovakvo formulisan, on nije matematički egzaktno rešiv. Zato ćemo ga uprostiti aproksimacijom u kojoj elektron posmatramo kao nezavisnu česticu koja se kreće u polju jezgara i ostalih elektrona. Korišćenjem formalizma funkcionala gustine moguće je dobiti jednoelektronsku sliku za ovakve sisteme. Ovaj formalizam se bazira na dve teoreme Hohenberg-a i Kohn-a [6], koji su razmatrali Hamiltonijam sistema M interagujućih elektrona koji se kreću u spoljašnjem potencijalu $v_{ext} (\vec{r}_j)$:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{M} (-\nabla_j^2) + \sum_{j=1}^{M} \sum_{j'=1}^{j-1} V^{ee} (r_{jj'}) + \sum_{j=1}^{M} v_{ext} (\vec{r}_j) \qquad (2.6)$$

Prvi član gornjeg izraza predstavlja kinetičku energiju, drugi energiju odbijanja među elektronima, a treći interakciju sa spoljašnjim potencijalom, koja uključuje i elektrostatičku interakciju sa nepokretnim jezgrima.

Prva teorema tvrdi da su spoljašnji potencijal v_{ext}, svojstvena funkcija osnovnog stanja ψ_0 i energija osnovnog stanja $\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle$ jedinstveni funkcionali elektronske gustine $n(\vec{r})$. Energija osnovnog stanja data je izrazom:

$$\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = F [n(\vec{r})] + \int v_{ext}(\vec{r})\, n(\vec{r})\, d\vec{r}, \qquad (2.7)$$

gde je

$$F\,[n(\vec{r})] = \langle \psi_0 | \sum_{j=1}^{M} (-\nabla_j^2) + \sum_{j=1}^{M} \sum_{j'=1}^{j-1} V^{ee}(r_{jj'}) | \psi_0 \rangle. \qquad (2.8)$$

U gornjem izrazu može se posebno izdvojiti Hartree-jev član koji opisuje Coulomb-ovu interakciju između elektrona, na sledeći način:

$$F\,[n(\vec{r})] = \frac{1}{2} \iint \frac{2n(\vec{r})\; n(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}\, d\vec{r}\; d\vec{r}\,' + G\,[n(\vec{r})]. \qquad (2.9)$$

Definisali smo još jedan funkcional, $G\,[n(\vec{r})]$ u koji, pored kinetičke energije elektrona, ulazi i razlika između stvarne energije interakcije i one koja se uračunata u Hartree-jev član. Ta razlika sadrži energiju izmene i korelacije elektrona.

Druga teorema Hohenberg-a i Kohn-a [6] tvrdi da funkcional (2.7) ima minimalnu vrednost kada je $n(\vec{r})$ stvarna elektronska gustina osnovnog stanja i da je ta vrednost jednaka energiji osnovnog stanja. Dakle, kada bismo poznavali funkcional $F[n(\vec{r})]$ bilo bi relativno jednostavno iskoristiti gornju teoremu pa odrediti energije osnovnog stanja i elektronske gustine za bilo koji dati spoljašnji potencijal v_{ext}. Međutim, taj funkcional nije poznat, i sve komplikacije oko rešavanja problema više elektrona vezane su za njegovo određivanje.

Primenom gornjih teorema, izračunavanje zonske strukture kristala svodi se na rešavanje Schrödinger-ove jednačine za elektron koji se kreće u lokalnom potencijalu $V_s(\vec{r})$:

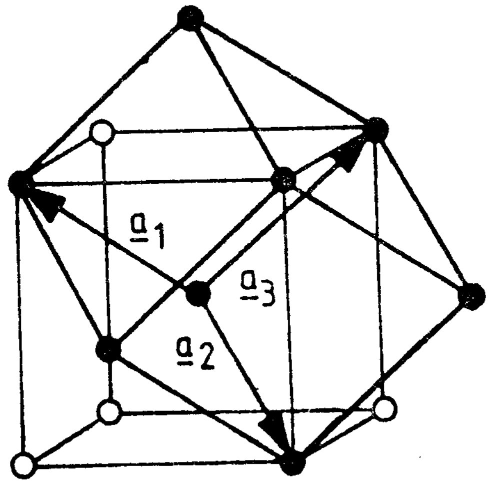
$$(-\nabla^2 + V_s(\vec{r}))\, \psi_j\, (\vec{k},\vec{r}) = E_j(\vec{k})\, \psi_j(\vec{k},\vec{r}). \qquad (2.10)$$

Oblik rešenja ove jednačine zavisi od simetrije Hamiltonijana $(-\nabla^2 + V_s(\vec{r}))$, koja je u prvom redu određena članom $V_s(\vec{r})$.

Potencijal u beskonačnom kristalu je invarijantan na translaciju rešetke. Zato se mora primeniti Bloch-ova teorema [8] po kojoj talasna funkcija u trodimenzionalnoj rešetki zadovoljava sledeći uslov:

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}}\,\psi(\vec{r}), \qquad (2.11)$$

gde je vektor rešetke $\vec{R} = \sum_i n_i \vec{a}_i$ linearna kombinacija vektora $\{a_i\}$ koji definišu primitivnu ćeliju (Sl. 2.1.).



Sl. 2.1.

Translacioni vektori $\{a_i\}$ i primitivna ćelija za bcc strukturu

Ovim je problem izračunavanja zonske strukture sveden na traženje svojstvenih vrednosti energije samo unutar primitivne ćelije zapremine $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$.

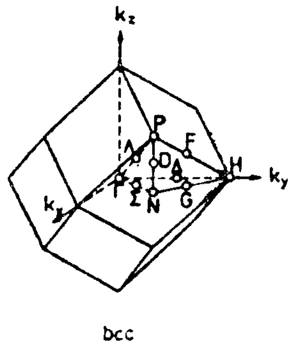
Bloch-ov vektor $\vec{k}$ (2.11) označava jednoelektronska stanja i pripada oblasti recipročnog prostora.

Ako energetske zone i talasne funkcije posmatramo kao funkcije talasnog vektora $\vec{k}$, videćemo da poseduju translacionu simetriju u recipročnoj rešetki:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G})$$
$$\psi(\vec{k},\vec{r}) = \psi(\vec{k} + \vec{G}, \vec{r}) \qquad (2.12)$$

gde je vektor recipročne rešetke $\vec{G} = \sum_j m_j \vec{b}_j$. $\{b_j\}$ su translacioni vektori koji zadovoljavaju uslov $\vec{a}_i \cdot \vec{B}_j = 2\pi\ \delta_{ij}$.

Posledica ove simetrije je mogućnost ograničenja izračunavanja zonske strukture na primitivnu ćeliju recipročnog prostora (Brillouin-ovu zonu Sl.2.2.). U teoriji grupa se pokazuje da je, zbog postojanja drugih simetrija, dovoljno da se zonska struktura izračuna samo u ireducibilnom delu Brillouin-ove zone.



Sl. 2.2.

Brillouin-ova zona za bcc strukturu

Pored Bloch-ovog vektora, za opisivanje elektronskih stanja u kristalu koristimo indeks zone j, koji se definiše sledećom relacijom:

$$E_j\ (\vec{k}) \le E_{j+1}\ (\vec{k}) \qquad (2.13)$$

Set funkcija $E_j^{\vec{k}}$ zove se energetska zonska struktura datog kristala.

Kohn i Sham [7] su uspeli da odrede jednočestični potencijal $V_s(\vec{r})$ tako da se stvarna gustina elektrona može odrediti znajući rešenja jednoelektronske Schrödinger-ove jednačine (2.10), na sledeći način:

$$n(\vec{r}) = \sum_{j\vec{k}}^{occ} | \psi_j \ (\vec{k},\vec{r})|^2 \qquad . \qquad (2.14)$$

Njihova ideja je da se $G\,[n(\vec{r})]$ predstavi kao:

$$G\,[n(\vec{r})] = T_S\,[n(\vec{r})] + E_{xc}\,[n(\vec{r})]\,, \qquad (2.15)$$

gde je $T_S\,[n(\vec{r})]$ kinetička energija interagujućih elektrona gustine $n(\vec{r})$:

$$T_S\,[n(\vec{r})] = \sum_{j\vec{k}}^{occ} \int \psi_j^* \ (\vec{k},\vec{r})\ (-\nabla^2)\ \psi_j \ (\vec{k},\vec{r})\ d\vec{r}, \qquad (2.16)$$

a $E_{xc}[n(\vec{r})]$ funkcional izmensko - korelacione energije.

Do sada smo izvodili dva izraza, Hartree-jev član u (2.8) i kinetičku energiju u (2.15), koja su važna za jedno-elektronsku sliku, ali koji takođe predstavljaju dominantne izraze kod interagujućih sistema.

Razliku između realnih i neinteragujućih sistema predstavlja član $E_{xc}[n(\vec{r})]$. Ako uvedemo aproksimaciju lokalne gustine, koja važi za sporo promenljive gustine i za slučaj velikih gustina, možemo pisati:

$$E_{xc}\,[n(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}(n(\vec{r}))\ n(\vec{r})\ d\vec{r}. \qquad (2.17)$$

Izraz za gustinu izmensko-korelacione energije $\varepsilon_{xc}(n(\vec{r}))$ sledi iz teorije homogenog elektronskog gasa gustine $n(\vec{r})$.

Sada se funkcional gustine može napisati u obliku:

$$\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle = T_S[n(\vec{r})] + \int\left\{\frac{1}{2}\int \frac{2n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,d\vec{r}\,' + v_{ext}(\vec{r}) + \varepsilon_{xc}(n(\vec{r}))\right\} n(\vec{r})\ d\vec{r} \qquad (2.18)$$

Minimalizacijom izraza (2.18) po $n(\vec{r})$ dobijamo efektivnu jednočestičnu Schrödinger-ovu jednačinu:

$$\left\{-\nabla^2 + \int \frac{2n(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,d\vec{r}\,' + v_{ext}(\vec{r}) + v_{xc}(n(\vec{r}))\right\} \psi_j(\vec{k},\vec{r}) = E_j(\vec{k})\ \psi_j(\vec{k},\vec{r}) \qquad (2.19)$$

Ako ovu jednačinu uporedimo sa jednačinom (2.10), vidimo da se neinteragujući elektroni moraju kretati u efektivnom potencijalu oblika:

$$V_s(\vec{r}) = \int \frac{2n(\vec{r}\,')\, d\vec{r}\,'}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} + v_{ext}(\vec{r}) + v_{xc}(n(\vec{r})). \qquad (2.20)$$

Ovde je prvi član klasičan Hartree-jev potencijal, drugi je spoljašnji potencijal koji uključuje Coulomb-ovo privlačenje od strane jezgara, a treći je izmensko-korelacioni potencijal dat izrazom:

$$v_{xc}(n(\vec{r})) = \frac{d(n(\vec{r})\ \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})))}{dn(\vec{r})}. \qquad (2.21)$$

Spoljašnji potencijal $v_{ext}(\vec{r})$ u većini slučajeva predstavlja Coulomb-ovo privlačenje od strane jezgara naelektrisanja Z, smeštenih u čvorove rešetke $\vec{R}$:

$$v_c(\vec{r}) = - \sum_{\vec{R}} \frac{2Z}{|\vec{r} - \vec{R}|}. \qquad (2.22)$$

Ovome treba dodati potencijal koji potiče od međusobnog odbijanja jezgara:

$$v_n = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}' \neq \vec{R}} \frac{2Z^2}{|\vec{R} - \vec{R}'|}. \qquad (2.23)$$

U aproksimaciji atomskih sfera (ASA), koju ćemo primeniti pri rešavanju svojstvenog problema (2.19), elektronska gustina je sferno simetrična unutar sfere radijusa S, centrirane u čvoru rešetke. Radijus ove sfere, za kristal sa jednim atomom po primitivnoj ćeliji, definiše se relacijom:

$$\Omega = \frac{4}{3} \pi S^3. \qquad (2.24)$$

Gustina elektrona u kristalu u tački $\vec{r}$ tada je:

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} n\,(|\vec{r} - \vec{R}|, S)\ \Theta\,(|\vec{r} - \vec{R}| - S),$$

gde je n(r) elektronska gustina unutar sfere radijusa S.

U slučaju jednog atoma po primitivnoj ćeliji broj elektrona u atomskoj sferi je Z, pa kada (2.22) i (2.23) uvrstimo u funkcional energije (2.18), nalazimo [9] da se elektrostatičke interakcije redukuju na interakcije sa poljem jezgara $-\frac{2Z}{r}$ koje sada predstavlja spoljašnji potencijal $v_{ext}(\vec{r})$. Pošto se ova interakcija svela na sferu, možemo minimalizovati funkcional energije (po atomu):

$$\langle\phi|H|\phi\rangle = T_S[n(r)]_{ASA} + \int\left\{\frac{1}{2}v_H(r) - \frac{2Z}{r} + \varepsilon_{xc}(n(r))\right\} n(r)d\vec{r}\ . \tag{2.25}$$

Ovde se integracija vrši po sferi radijusa S, a Hartree-jev potencijal $v_H(r)$ definiše se sledećom relacijom [9]:

$$v_H(r) = \int_S \frac{2n(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}\, d\vec{r}\,'\ . \tag{2.26}$$

Minimalizacijom (2.25) po n(r) dobija se jednoelektronska Schrödinger-ova jednačina oblika (2.10), koja važi unutar svake atomske sfere, a efektivni jednoelektronski potencijal dat je izrazom:

$$V_S(r) = v_H(r) - \frac{2Z}{r} + v_{xc}\ (n(r))\ . \tag{2.27}$$

Elektronska zonska struktura za dati kristal dobija se "šivenjem" rešenja (2.10) i (2.27) od sfere do sfere.

Kinetička energija $T_S[n(r)]$, (2.25), dobija se iz (2.10) i (2.27) i ima oblik:

$$T_S\ [n(r)] = \sum_{j\vec{k}}^{occ} E_j(\vec{k}) - \int_S V_S(r)\ n(r)\ d\vec{r}. \tag{2.28}$$

Kako efektivni jednoelektronski potencijal (2.27) zavisi od elektronske gustine koju želimo da nađemo, moramo samo-usaglašeno rešiti problem, koristeći jednačine (2.10), (2.14), (2.21), (2.26) i (2.27). U početku samosaglasne procedure za gustinu elektrona n(r) uzima se elektronska gustina u slobodnom atomu normirana na atomsku sferu radijusa S. Sa tom gustinom izračunava se zonska struktura pomoću LMTO metoda. Zatim se odredi elektronska gustina koju koristimo za konstrukciju novog jednoelektronskog potencijala (2.27). Tako se zatvara jedna petlja u self - konzistentnom procesu koji se prekida kada se, do nivoa dozvoljene greške, usaglase elektronske gustine iz dve uzastopne iteracije.

2.2. Metodi za izračunavanje zonske strukture

Pre nego što pređemo na proučavanje LMTO metoda, reći ćemo nešto uopšteno o svim metodama za izračunavanje zonske strukture i pokušati da objasnimo zašto smo se opredelili baš za ovaj metod. Pri tome ćemo imati na umu sledeće osnovne zahteve koje ovi metodi treba da ispune:

a) fizička transparentnost,

b) numerička preciznost,

c) primenljivost na sve atome periodnog sistema elemenata

i d) primenljivost na realne strukture npr. kristale sa više atoma po primitivnoj ćeliji, kristale sa nečistoćama...

Svi metodi izračunavanja zonske strukture zasnivaju se na razvijanju talasne funkcije po nekom bazisu, što se može prikazati na sledeći način:

$$\psi = \sum_i a_i \chi_i \qquad . \tag{2.29}$$

Prvo što pada na pamet je razvoj po ravnim talasima. Ovakav prilaz ima ozbiljan nedostatak. Naime, nemoguće je dobiti korektan oblik talasne funkcije u blizini jezgra bez uvođenja velikog broja ravnih talasa malih talasnih dužina i visokih energija. Ako se ravni talasi ortogonalizuju na stanja atomske kore, ovaj nedostatak se otklanja i dobija se "ortogonalised plane wave" (OPW) metod. Atomsku koru čine jezgro i unutrašnje ljuske popunjene elektronima. Stanja atomske kore definisana su izrazima (3.23). Ortogonalizacija može biti ugrađena u obliku repulzivnog doprinosa potencijalu u oblasti jezgra i tada se OPW metod pretvara u često primenjivanu teoriju pseudopotencijala. Osnovna ideja ove teorije je da valentni elektroni, umesto kristalnog potencijala, osećaju znatno slabiji efektivni potencijal - pseudopotencijal. On je toliko slabiji od kristalnog potencijala da ne uspeva da stvori vezana stanja, zbog čega se na lak način može opisati ponašanje valentnih elektrona. Poslednjih godina postoji velika aktivnost na zasnivanju tzv. "ab-initio" pseudopotencijala. Postoje izračunati ovi pseudopotencijali za skoro sve elemente periodnog sistema. Ipak, za primenu ovog, potrebni su moćni računari tipa Cray, pa za većinu istraživačkih centara u svetu nije ispunjen zahtev br.2.

Prema zavisnosti bazisnih funkcija χ_i od energije, metode za izračunavanje zonske strukture možemo podeliti na linearne i nelinearne. Prva grupa metoda za dobijanje sekularne jednačine obično koristi varijacioni princip za Schrödinger-ovu jednačinu sa fiksnim bazisnim funkcijama koje ne zavise od energije. Sekularna jednačina je linearna po energiji:

$$(\underline{\underline{H}} - E\underline{\underline{O}})_{ij}\, a_{ij} = 0 \qquad . \qquad (2.30)$$

Nelinearni metodi se uglavnom baziraju na razlaganju talasne funkcije po tzv. parcijalnim talasima, koji zavise od energije. Ovi metodi sekularnu matricu obično dobijaju primenom "tail cancellation" [9] teoreme, i ona ima sledeći oblik:

$$\underline{\underline{M}}(E)_{ij}\, a_{ij} = 0 \qquad . \qquad (2.31)$$

Najpoznatiji nelinearni metodi su celularni, "augmented plane wave" (APW) i "The Korringa - Kohn - Rostoker" (KKR) metodi. Svi oni se uspešno mogu koristiti za široki spektar materijala. Ipak, sekularna jednačina (2.31) je zbog svoje nelinearnosti komplikovanija od jednačine (2.30) i njeno rešavanje zahteva vreme za red veličine duže od onog koje je potrebno da se reši sistem (2.30).

Najviše upotrebljavani linearni metodi su "linear APW" i LMTO metod. Od ova dva metoda, prvi je primenljiv na širi spektar materijala, njegova tačnost je velika i može se koristiti na velikim opsezima energija. To je zato što se uz bazisni set, koji se sastoji od ravnih talasa, mogu lako uključiti i doprinosi potencijalu koji nisu uračunati u MT potencijal. Ali, kada su prisutne d zone, ponašanje u intersticijalnoj oblasti ne može se opisati sa manje od 25-30 ravnih talasa po atomu. U ovom slučaju je LMTO metod daleko efikasniji jer je potrebno samo devet s,p i d MT orbitala po atomu, što omogućava veliku brzinu izračunavanja. Ali, pošto metod ima grešku proporcionalnu sa $(E - V_{MTZ})^2$, može se koristiti samo za gusto pakovane rešetke i ograničenu oblast energije.

U LMTO metodu su ujedinjene dobre osobine metoda fiksnih bazisa nezavisnih od energije i metoda parcijalnih talasa. Ovaj metod koristi fiksni bazis u obliku MT orbitala. Te orbitale su svugde neprekidne i diferencijabilne, a konstruisane su od parcijalnih talasa $\phi_l(E_\nu,r)$ i njihovih prvih izvoda po energiji $\dot{\phi}_l(E_\nu,r) = \left.\frac{\partial\ \phi_l(E,r)}{\partial\ r}\right|_{E=E_\nu}$, uzetih u zadatoj vrednosti energije E_ν, koja je za nas od interesa.

LMTO metod ima još jednu izrazitu pogodnost. Njegova sekularna jednačina se može podeliti na dva nezavisna dela: deo koji zavisi samo od potencijala i deo koji zavisi samo od strukture kristala. Potencijal u LMTO metod ulazi samo preko funkcija oblika $\frac{S\ \phi_l'(E,S)}{\phi_l(E,S)}$, tj. preko parametara koji se formiraju pomoću ovih, energetski zavisnih funkcija, definisanih u Glavi 3. ovog rada.

Struktura kristala opisana je veličinama koje ćemo zvati strukturnim konstantama, o kojima ćemo detaljno govoriti u ovom radu. Strukturne konstante se izračunavaju samo jednom u self - konzistentnom procesu izračunavanja zonske strukture.

Posebna pogodnost LMTO metoda u ASA aproksimaciji, kojim se mi bavimo, je u tome što strukturne konstante postaju nezavisne od energije i od dimenzija primitivne ćelije kristala. Takve strukturne konstante nazivamo kanonskim. Znači da sada, ako imamo izračunate strukturne konstante za određenu kristalnu strukturu, možemo te podatke koristiti u svim izračunavanjima zonske strukture za taj tip strukture kristala. Ovim se uveliko dobija na brzini i jednostavnosti izračunavanja zonske strukture.

U ovom radu će biti izračunate matrice strukturnih konstanti za zapreminski centriranu kubnu (bcc) strukturu. U svim primenama LMTO metoda, ove se matrice mogu koristiti bez ponovnog računanja.

3. LMTO METOD U ASA SA MTO

3.1. Konstrukcija MTO

Pored toga što poseduje tačnu translacionu simetriju, potencijal $V_s(\vec{r})$ poseduje i lokalnu približnu sfernu simetriju, koja je naročito izražena u blizini atoma i slična je kao u slučaju slobodnog atoma. U gusto pakovanim rešetkama, koje ćemo mi proučavati, potencijal $V_s(\vec{r})$ možemo smatrati konstantnim u prostoru između atoma, što znači da se sferna simetrija potencijala proširuje i na prostor izvan atomskog poliedra. Ovo nam omogućava da potencijal $V_s(\vec{r})$ aproksimiramo potencijalom sledećeg analitičkog oblika:

$$V_{MT}(r) = \begin{cases} v(r) - V_{MTZ} & , \quad r \leq S_{MT} \\ 0 & , \quad r \geq S_{MT} \end{cases} \tag{3.1}$$

Ovakav potencijal, koji zovemo "muffin-tin" potencijalom (MT potencijal), prikazan je na Sl. 3.1.

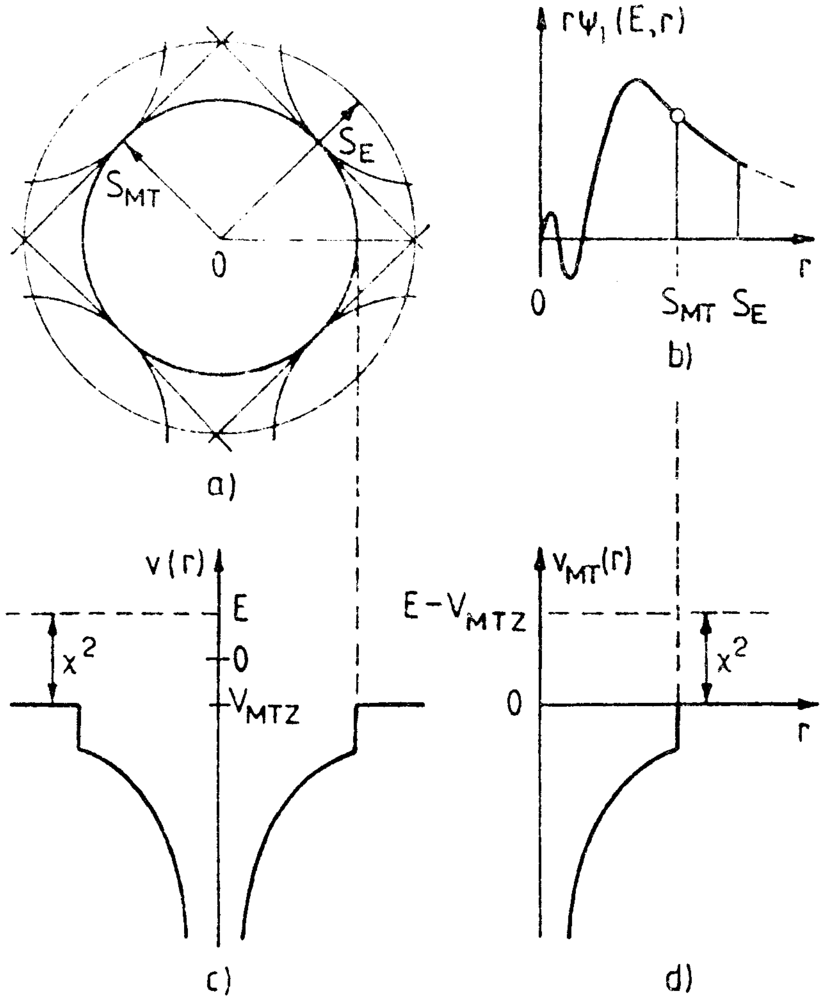
Schrödinger-ova jednačina (2.10) će sada imati sledeći oblik:

$$\left(-\nabla^2 + \sum_{\vec{R}} V_{MT}\left(|\vec{r} - \vec{R}|\right) - \varkappa^2\right) \psi_j(\vec{k},\vec{r}) = 0 \tag{3.2}$$

pri čemu se sumiranje vrši po svim čvorovima kristala, a kinetička energija u intersticijalnoj oblasti je:

$$\varkappa^2 = E - V_{MTZ} \tag{3.3}$$

Ova aproksimacija važi samo ako je talasna dužina $\frac{2\pi}{\varkappa}$ velika u poređenju sa rastojanjem $S_{MT}-S_E$ na Sl. 3.1.a), tj. širinom intersticijalne oblasti. Kako su nama interesantni uglavnom elektroni čija je kinetička energija između -1Ry i



Sl. 3.1. "Muffin-tin" aproksimacija

a) "muffin-tin" sfera radijusa S_{MT}, elementarna ćelija i opisana sfera oko nje, radijusa S_E

b) radijalna talasna funkcija

c) "muffin-tin" deo kristalnog potencijala v(r)

d) MT potencijal

+1Ry, gornji kriterijum će u svim gusto pakovanim kristalima biti ispunjen.

Aproksimacija MT potencijalom veoma uprošćava traženje rešenja za $r > S_{MT}$ zato što komplikovano "šivenje" rešenja na poliedru sada postaje daleko jednostavnije "šivenje" na sferi.

Za konstruisanje MTO potrebna su nam rešenja Schrödinger-ove jednačine za kretanje elektrona u izolovanom MT potencijalu:

$$(-\nabla^2 + V_{MT}(r) - \varkappa^2)\, \psi_L(E,\vec{r}) = 0 \tag{3.4}$$

za sve vrednosti $\varkappa^2$, tj. kontinualna i vezana stanja. U ovom slučaju sferna simetrija važi za ceo prostor, pa ćemo rešenja tražiti u sledećem obliku:

$$\psi_L\,(E,\vec{r}) = i^{l}\; Y_l^m(\hat{\vec{r}})\; \psi_l(E,r) \tag{3.5}$$

gde je $\hat{\vec{r}} = \dfrac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$ ort vektora, i^l je fazni faktor sfernih harmonika u konvenciji Condon-a i Shortley-a. $Y_l^m(\hat{\vec{r}})$ su sferni harmonici. Indeks L je skraćenica za l,m.

Unutar MT potencijalne jame rešenje mora biti regularno u koordinatnom početku i njegov radijalni deo se dobija numeričkim rešavanjem radijalne Schrödinger-ove jednačine:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_{MT}(r) - \varkappa^2\right) r\, \psi_l(E,r) = 0 \tag{3.6}$$

U oblasti konstantnog potencijala rešenja jednačine (3.4) su sferni talasi talasnog broja $\varkappa$, čiji radijalni delovi zadovoljavaju jednačinu:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}-E\right) r y_l(\varkappa r)=0 \tag{3.7}$$

Ovo je Helmholtz-ova talasna jednačina koja ima dva linearno nezavisna rešenja, za koja možemo uzeti sferne Bessel-ove $j_l(\varkappa r)$ i Neumann-ove $n_l(\varkappa r)$ funkcije. Navešćemo neke asimptotske osobine ovih funkcija:

$$\left.\begin{array}{l} j_l(\varkappa r) \longrightarrow \dfrac{(\varkappa r)^l}{(2l+1)!!} \\[2ex] n_l(\varkappa r) \longrightarrow -\dfrac{(2l-1)!!}{(\varkappa r)^{l+1}} \end{array}\right\} \text{za} \quad \varkappa r \to 0 \tag{3.8}$$

$$\left.\begin{array}{l} j_l(\varkappa r) \longrightarrow \dfrac{\sin(\varkappa r - \frac{l\pi}{2})}{\varkappa r} \\[2ex] n_l(\varkappa r) \longrightarrow -\dfrac{\cos(\varkappa r - \frac{l\pi}{2})}{\varkappa r} \end{array}\right\} r \to \infty \tag{3.9}$$

Rešenja jednačine (3.4) zvaćemo parcijalnim talasima. Formiraćemo ih "šivenjem" rešenja jednačine (3.7) za intersticijalnu oblast sa rešenjem jednačine (3.6) unutar MT sfere na granici sfere:

$$\psi_L(E,\varkappa,\vec{r}) = i^l\, Y_l^m(\hat{\vec{r}}) \begin{cases} \psi_l(E,r), & r \le S_{MT} \\ \varkappa(n_l(\varkappa r) - \cot(\eta_l)\, j_l(\varkappa r)), & r \ge S_{MT} \end{cases} \tag{3.10}$$

Iz asimptotike (3.9) sledi da se parcijalni talas za veliko r ponaša kao sferni talas čija je faza, zbog MT potencijala, pomerena za η_l, tj.:

$$\psi_l(E,\varkappa,r) \underset{r \to \infty}{\sim} - \frac{\sin\left(\varkappa r + \eta_l - \frac{l\pi}{2}\right)}{r \sin(\eta_l)} .$$

Zato se η_l zove fazni pomeraj.

Kako je (3.4) diferencijalna jednačina drugog reda, biramo $\psi_l(E,S_{MT})$ i $\cot(\eta_l)$ tako da parcijalni talas bude svuda neprekidan i diferencijabilan:

$$\cot(\eta_l(E,\varkappa)) = \frac{n_l(\varkappa r)}{j_l(\varkappa r)} = \left. \frac{D_l(E) - \varkappa r \dfrac{n_l'(\varkappa r)}{n_l(\varkappa r)}}{D_l(E) - \varkappa r \dfrac{j_l'(\varkappa r)}{j_l(\varkappa r)}} \right|_{r=S_{MT}} \tag{3.11}$$

Ovde je $D_l(E)$ logaritamski izvod funkcije $\psi_l(E,r)$, definisan sledećim izrazom:

$$D_l(E) = \left. \frac{S_{MT}}{\psi_l(E,S_{MT})} \frac{\partial \psi_l(E,r)}{\partial r} \right|_{r=S_{MT}} . \tag{3.12}$$

Rešenja (3.10) još ne možemo koristiti kao bazisne funkcije zato što zavise od energije i zato što se za $\varkappa^2 < 0$ mogu normirati samo za svojstvene vrednosti energije u potencijalnoj jami.

Da bi se napravili parcijalni talasi normalizabilni za sve vrednosti $\varkappa^2$, dodaje se sferna Bessel-ova funkcija, čime se otklanja deo koji uslovljava divergentnost integrala. Tako se dobijaju energetski zavisne "muffin-tin" orbitale (MTO):

$$\chi_L(E,\varkappa,\vec{r}) = i^l \, Y_l^m(\hat{\vec{r}}) \begin{cases} \psi_l(E,r) + \varkappa \cot(\eta_l) \, j_l(\varkappa r), & r \le S_{MT} \\ \varkappa \, n_l(\varkappa r) & , \; r \ge S_{MT} . \end{cases} \tag{3.13}$$

Važno je primetiti da je funkcija unutar MT sfere regularna u koordinatnom početku, a da je rep $\varkappa n_l(\varkappa r)$

regularan u beskonačnosti.

Zbog prisustva sferne Bessel-ove funkcije u MT sferi, MT orbitale definisane na ovaj način nisu više svojstvene funkcije za MT potencijal $V_{MT}(r)$, izuzev za vezana stanja i za slučaj kada je konstanta integracije (3.11) jednaka nuli.

Međutim Bloch-ove sume za $\psi_l(E,\varkappa,\vec{r})$ i $\chi_l(E,\varkappa,\vec{r})$ su identične, jer je njihova razlika jednaka Bloch-ovoj sumi sfernih Bessel-ovih funkcija, koja je jednaka nuli za sve vrednosti osim za parabolu slobodnog elektrona $|\vec{k}+\vec{G}| = \varkappa^2$.

Da bi se mogle koristiti u varijacionoj proceduri, pomoću koje se dobija sekularna jednačina linearna po energiji, MTO ne smeju zavisiti od energije. Pored toga, bazisne funkcije moraju biti ortogonalne na stanja kore, kako svojstvene vrednosti ne bi konvergirale na ta stanja. Kako svakve MTO ne ispunjavaju gornje uslove, ne može ih koristiti za bazisne funkcije.

Po definiciji (3.13) amplituda orbitale $\varkappa n_l(\varkappa S_{MT})$ i njen logaritamski izvod na sferi $\varkappa S_{MT}\,\dfrac{n_l'(\varkappa S_{MT})}{n_l(\varkappa S_{MT})}$, kao u ceo njen rep zavise od energije samo preko $\varkappa$. Ako bismo mogli da zanemarimo vezu (3.3) i da fiksiramo $\varkappa$ na neku pogodnu vrednost, zavisnost repa od energije bila bi potisnuta. Kako sve to važi na sferi, zbog neprekidnosti neće ni "unutrašnja" orbitala na sferi zavisiti od energije, tako da će energetska zavisnost orbitale unutar sfere biti skoro potpuno potisnuta.

Po konstrukciji su parcijalni talas (3.10) i MTO (3.13) svugde neprekidni i diferencijabilni, a fazni pomak (3.11) održava te osobine za svaku vrednost E i $\varkappa^2$, nezavisno od njihove međusobne veze. Štaviše, parcijalni talas je rešenje Schrödinger-ove jednačine (3.4) u celom prostoru ako važi (3.3). U tom slučaju $\varkappa^2$ je tačna kinetička energija u oblasti konstantnog potencijala, a η_l je funkcija samo od E.

Znači, možemo definisati neprekidne i diferencijabilne talasne funkcije čak i kada (3.3) nije ispunjeno i rep nije tačno rešenje Schrödinger-ove jednačine u oblasti sa konstantnim potencijalom. Nadalje ćemo energiju orbitale E i talasni broj repa $\varkappa$ tretirati kao potpuno nezavisne veličine, fiksiraćemo $\varkappa$ na neku pogodnu vrednost i koristiti linearnu kombinaciju ovakvih orbitala u varijacionoj proceduri.

Sada ćemo proširiti MTO (3.13). Može se pokazati da tako proširene:

$$\chi_L(E,\varkappa,\vec{r}) = i^l Y_l^m(\hat{\vec{r}}) \begin{cases} \psi_l(E,r) + \varkappa\cot(\eta_l)\, J_l(\varkappa r), & r \le S_{MT} \\ \varkappa N_l(\varkappa r) & , r \ge S_{MT} \end{cases} \tag{3.17}$$

za poseban izbor Bessel-ovih i Neumann-ovih funkcija $J_l(\varkappa r)$ i $N_l(\varkappa r)$, mogu postati energetski nezavisne oko neke fiksirane energije E_ν sa tačnošću do prvog reda po $(E - E_\nu)$.

Simultano, MTO postaju ortogonalne na stanja kore, čime se osigurava da LMTO metod neće konvergirati na svojstvene vrednosti kore.

Treba obratiti pažnju na to da kada se $\varkappa$ fiksira, sferne Bessel-ove i Neumann-ove funkcije više nisu rešenje Schrödinger-ove jednačine (3.6) za konstantan potencijal. Tako sada one mogu biti proširene pogodnim funkcijama koje im se pridružuju na sferi, održavajući pri tome neprekidnost i diferencijabilnost.

Za konstrukciju energetski nezavisnih MTO koristi se takozvani $(\phi, \dot{\phi})$ formalizam Andersena, detaljno opisan u literaturi [9]. On se, ukratko, sastoji u tvrđenju da se radijalna probna talasna funkcija sa proizvoljnim logaritamskim izvodom D na granici sfere može, sa tačnošću do prvog reda po $(E - E_{\nu})$, predstaviti u obliku:

$$\phi_l(D,r) = \phi_{\nu l}(r) + \omega_l(D)\,\dot{\phi}_{\nu l}(r)$$
$$\omega_l(D) = -\frac{\phi_{\nu}}{\dot{\phi}_{\nu}}\,\frac{D - D_{\nu}}{D - D_{\dot{\nu}}}\,, \tag{3.18}$$

pri čemu smo koristili oznake: $\phi_{\nu} \equiv \phi_{\nu}(S)$ i $\dot{\phi}_{\nu} \equiv \dot{\phi}_{\nu}(S)$.

Veza $\phi_{\nu l}(r)$ i radijalne funkcije $\psi_{\nu l}$ je sledeća:

$$\phi_{\nu l}(E_{\nu l}, r) = \frac{\psi_l(E_{\nu}, r)}{\sqrt{\langle\psi_l^2(E_{\nu l}, r)\rangle}} \tag{3.19}$$

$$(\hat{H} - E_{\nu l})|\,\psi_l(E_{\nu}, r)\rangle = 0. \tag{3.20}$$

Pri tome je ϕ_l normirano na jedinicu unutar sfere radijusa S (uzima se da je $S_{MT} \equiv S$), jer je:

$$\langle\psi_l^2(E,r)\rangle = \int_0^S \psi_l(E,r) r^2 dr. \tag{3.21}$$

Veličine $\phi_{\nu l}$, $\dot{\phi}_{\nu l}$, $D_{\nu l}$ i $D_{\dot{\nu} l}$ definisane su na sledeći način:

$$\text{a)}\quad \phi_{\nu l}(r) = \phi_l(E_{\nu l}, r) \qquad\qquad \text{c)}\quad D_{\nu l} = \frac{S\phi'_{\nu l}(S)}{\phi_{\nu l}(S)}$$

$$\text{b)}\quad \dot{\phi}_{\nu l}(r) = \left.\frac{\partial\, \phi_l(E,r)}{\partial E}\right|_{E=E_{\nu l}} \qquad \text{d)}\quad D_{\dot{\nu} l} = \frac{S\dot{\phi}'_{\nu l}(S)}{\dot{\phi}_{\nu l}(S)} \tag{3.22}$$

gde je $' \equiv \frac{\partial}{\partial r}$.

Može se pokazati da su ϕ_{ν} i $\dot{\phi}_{\nu}$ međusobno ortogonalne funkcije, ali i da su ortogonalne stanjima atomske kore $\phi_n(r)$, koja su definisana na sledeći način:

$$\begin{aligned} &\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \\ &D\{\phi_n\} = D_\nu \;, \quad n\neq\nu \\ &\phi_n(S) \ll \phi_\nu(S) \end{aligned} \tag{3.23}$$

Pobrojane osobine $(\phi,\dot{\phi})$ formalizma nam dopuštaju da tvrdimo da ćemo, ako dodamo funkciji $\psi_{\nu l}$ funkciju $\dot{\psi}_{\nu l}$ (do na koeficijent), dobiti energetski nezavisne MTO. Detaljan dokaz ovog tvrđenja može se naći u literaturi [9].

Konačan oblik energetski nezavisnih MTO je sledeći:

$$\chi_L(\varkappa,\vec{r}) = i^l\, Y_l^m(\hat{\vec{r}}) \begin{cases} \dfrac{\varkappa n_l(\varkappa S)}{\phi_l(D\{n_l\},S)}\,\phi_l(D\{n_l\},r) \;, & r \le S_{MT} \\ \varkappa N_l(\varkappa r) \;, & r \ge S_{MT} \end{cases} \tag{3.24}$$

gde je $\phi_l(D\{n_l\},S)$ definisano izrazom (3.18) tako što je D zamenjeno logaritamskim izvodom sferno Neumann-ove funkcije n_l na sferi radijusa S.

Proširena sferna Neumann-ova funkcija data je izrazom:

$$N_L(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}) = \begin{cases} 4\pi \sum\limits_{L'} \sum\limits_{L''} C_{LL'L''}\, J_{L'}(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}')\, n^{*}_{L''}(\varkappa,\vec{R}-\vec{R}') & \begin{cases} \text{za } |\vec{r}-\vec{R}'| \le S_{MT} \\ \forall \vec{R}' \neq \vec{R} \end{cases} \\ n_L(\varkappa,\ \vec{r}-\vec{R}) & \text{u ostalim slučajevima,} \end{cases} \tag{3.25}$$

a proširena sferna Bessel-ova funkcija ima oblik:

$$J_l(\varkappa r) = \begin{cases} \dfrac{j_l(\varkappa S)}{\phi\,(D\{j_l\},S)}\,\phi\,(D\{j_l\},r) \;, & r \le S_{MT} \\ j_l(\varkappa r) \;, & r \ge S_{MT} \;. \end{cases} \tag{3.26}$$

$C_{LL'L''}$ su Gaunt-ovi koeficijenti. O njima ćemo detaljnije govoriti u sledećoj glavi.

Izrazima (3.24) - (3.26) definisali smo energetski nezavisne MTO koje imaju sledeće osobine:

a) ne zavise od energije,

b) svuda su neprekidne i diferencijabilne funkcije i

c) ortogonalne su na stanja atomske kore.

Prema tome, ove orbitale su pogodan izbor za bazisne funkcije.

3.2. Svojstveni problem u LMTO metodu

Rešenja Schrödinger-ove jednačine (3.2) tražićemo u obliku linearne kombinacije MTO:

$$\psi_j\ (\vec{k},\vec{r}) = \sum_{L} \alpha_L^{\vec{k}}\ \chi_L^{\vec{k}}\ (\varkappa,\vec{r}), \tag{3.27}$$

gde smo uveli Bloch-ovu sumu MTO:

$$\chi_L^{\vec{k}}\ (\varkappa,\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}}\ \chi_L(\varkappa,\ \vec{r} - \vec{R}). \tag{3.28}$$

Ovakav, policentrični, razvoj može se predstaviti kao razvoj po talasnim funkcijama centriranim u jednom centru, na sledeći način:

$$\chi_L^{\vec{k}}\ (\varkappa,\vec{r}) = \chi_L\ (\varkappa,\vec{r}) + \sum_{L'} J_{L'}(\varkappa,\vec{r})\ B_{L'L}^{\vec{k}}\ (\varkappa), \tag{3.29}$$

pri čemu su $B_{L'L}^{\vec{k}}(\varkappa)$ tzv. KKR strukturne konstante čiji je oblik dat relacijama:

$$B_{L'L}^{\vec{k}}\ (\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\ \varkappa\ n_{L''}^{*}(\varkappa,\vec{R}) \tag{3.30}$$

$$C_{LL'L''} = \int d\Omega\, Y_l^m(\hat{\vec r})\, Y_{l'}^{m'*}(\hat{\vec r})\, Y_{l''}^{m''}(\hat{\vec r}) =$$

$$= \left(\frac{2l''+1}{4\pi}\right)^{1/2} c^{l''}(l'm';\ lm). \qquad (3.31)$$

$$c^{l''}(l'm',lm) = \left(\frac{2l+1}{2l'+1}\right)^{1/2} A^{l''\,l\,l'}_{o\ \ o\ o}\ A^{l''\ l\ l'}_{m''\,m\,m'} .$$

A su Clebsch - Gordon-ovi koeficijenti.

Detaljno izvođenje gornjeg tvrđenja može se pronaći u Glavi 4.2. ovog rada.

Primenom Rayleigh - Ritz-ovog varijacionog principa

$$\delta\,(\langle\psi\,|H - E|\,\psi\rangle) = 0, \qquad (3.32)$$

na linearnu kombinaciju (3.27) dobija se sledeći, homogen sistem linearnih jednačina:

$$\sum_L \alpha_L^{\vec k}\, \langle\chi_{L'}^{\vec k}\,|H - E|\,\chi_L^{\vec k}\rangle = 0. \qquad (3.33)$$

Ovaj sistem ima netrivijalna rešenja kada je ispunjen sledeći uslov:

$$\det\left\{\langle\chi_{L'}^{\vec k}\ |H - E|\ \chi_L^{\vec k}\rangle\right\} = 0. \qquad (3.34)$$

Kako su MTO svugde neprekidne i diferencijabilne, možemo integral po celom prostoru, iz (3.33), razbiti na sumu integrala po atomskim poliedrima. Posle primene Bloch-ovog razvoja i preuređenja sume po rešetki, dobija se sledeći rezultat:

$$\frac{1}{N}\langle\chi_{L'}^{\vec k}\,|H - E|\,\chi_L^{\vec k}\rangle = \langle\chi_{L'}^{\vec k}\,|H - E|\,\chi_L^{\vec k}\rangle_o . \qquad (3.35)$$

Integracija na desnoj strani provodi se samo po poliedru centriranom u koordinatnom početku.

Sekularna matrica se sada dobija ubacivanjem razvoja (3.29) u gornji izraz. Uz sfernu simetriju potencijala i aproksimaciju atomskog poliedra sferom, dolazi se do sledećeg izraza:

$$\langle \chi^{\vec{k}}_{L'} | H - E | \chi^{\vec{k}}_{L} \rangle = \langle \chi_{l} | H - E | \chi_{l} \rangle_{o}\ \delta_{L'\,L} +$$

$$= \{ \langle \chi_{l'} | H - E |\ J_{l'} \rangle_{o} + \langle J_{l} | H - E |\ \chi_{l} \rangle_{o} \}\ B^{\vec{k}}_{L'\,L} +$$

$$= \sum_{L} B^{\vec{k}}_{L'\,L''} \langle J_{l''} | H - E |\ J_{l''} \rangle_{o}\ B^{\vec{k}}_{L''\,L} . \qquad (3.36)$$

Pri izvođenju gornjeg izraza koristi se osobina ermitovosti matrice strukturnih konstanti. Ova osobina će biti dokazana kasnije.

Gornja matrica se lako može napisati u bazisu energetski nezavisnih MTO (3.24) - (3.26). Iz (3.36) se vidi da postoji sedam različitih integrala i njih razvijamo pomoću sledećih formula [10]:

$$\langle \phi_{l'\,m'}(D') | H - E_{\nu l} |\ \phi_{l m}(D) \rangle = \omega_{l}(D)\ \delta_{l'\,l}\delta_{m'\,m}$$

$$(3.37)$$

$$\langle \phi_{l'\,m'}(D') | \phi_{l m}(D) \rangle = \delta_{l'\,l}\ \delta_{m'\,m}(1 + \omega_{l}(D')\ \omega_{l}(D)\ \langle \dot{\phi}^{2}_{\nu l} \rangle) .$$

U ovim formulama ćemo izvršiti smene $D \longrightarrow D\{n\}$ i $D' \longrightarrow D\{j\}$. Dalje ćemo radijus MT sfere S_{MT} zameniti radijusom atomske sfere S, koristićemo oznake $\phi\{n\} = \phi(D\{n\},S)$, $\phi\{j\} = \phi(D\{j\},S)$ i sledeće formule [9]:

$$D\{n\} - D\{j\} = \frac{1}{\varkappa S\ n(\varkappa S)\ j(\varkappa S)}$$

$$(3.38)$$

$$S\phi\{n\}\ \phi\{j\} = - \frac{\omega\{n\} - \omega\{j\}}{D\{n\} - D\{j\}} ,$$

gde je funkcija ω definisana izrazom (3.18).

Izvršićemo renormiranje strukturne konstante (3.30) na sledeći način:

$$S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa) = \frac{B^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)}{\frac{\varkappa^2 S}{2}\, n_{l'}(\varkappa S)\; n_l(\varkappa S)} \tag{3.39}$$

da bi ceo formalizam mogao da važi i za $\varkappa^2 = 0$.

LMTO sekularna matrica se sada može pisati u obliku $\underline{\underline{H}}-E\underline{\underline{O}}$, koji odgovara svojstvenom problemu:

$$\sum_{L} \left(H^{\vec{k}}_{L'L} - E^{j\vec{k}}\, O^{\vec{k}}_{L'L}\right) \alpha^{j\vec{k}}_{L} = 0 \tag{3.40}$$

i koji se može efikasno rešiti numerički da se dobiju svojstvene vrednosti $E^{i\vec{k}}$ i svojstveni vektori $\alpha^{j\vec{k}}_{L}$. Matrica hamiltonijana data je sledećim izrazom:

$$H^{\vec{k}}_{L'L} = \left[\frac{\omega\{n\} + E_{\nu}(1 + \omega^2\{n\}\,\langle\dot{\phi}^2\rangle)}{\frac{S}{2}\,\phi^2\{n\}}\right]_{l} \delta_{L'L} +$$

$$+ \left\{\left[\frac{\omega\{j\} + E_{\nu}(1 + \omega\{j\}\,\omega\{n\}\,\langle\dot{\phi}^2\rangle)}{\omega\{j\} - \omega\{n\}}\right]_{l'} + [\ldots]_{l} - 1\right\} S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa) +$$

$$+ \sum_{L''} S^{\vec{k}}_{L'L''}(\varkappa) \left[\frac{\omega\{j\} + E_{\nu}(1 + \omega^2\{j\}\,\langle\dot{\phi}^2\rangle)}{2(D\{j\} - D\{n\})^2\; S\phi^2\{j\}}\right]_{l''} S^{\vec{k}}_{L''L}(\varkappa), \tag{3.41}$$

dok matrica prekrivanja MTO ima oblik:

$$O^{\vec{k}}_{L'L} = \left[\frac{1 + \omega^2\{n\}\,\langle\dot{\phi}^2\rangle}{\frac{S}{2}\,\phi^2\{n\}}\right]_{l} \delta_{L'L} +$$

$$+ \left\{\left[\frac{1 + \omega\{j\}\,\omega\{n\}\,\langle\dot{\phi}^2\rangle}{\omega\{j\} - \omega\{n\}}\right]_{l'} + [\ldots]_{l}\right\} S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa) + \tag{3.42}$$

$$+ \sum_{L''} S^{\vec{k}}_{L'L''}(\varkappa) \left[\frac{\omega\{j\} + E_{\nu}(1 + \omega^2\{j\}\,\langle\dot{\phi}^2\rangle)}{2(D\{j\} - D\{n\})^2\; S\phi^2\{j\}}\right]_{l''} S^{\vec{k}}_{L''L}(\varkappa) .$$

U gornjim formulama koristili smo oznaku $[\ldots]_{l}$ kojom smo skratili zapis. Ona znači da sve funkcije u zagradi imaju indeks l i oblik kao u zagradi sa indeksom l'.

Jednačine (3.41) - (3.42) imaju izrazitu pogodnost da je deo koji zavisi od strukture kristala odvojen od parametara koji zavise od potencijala, a to su $\omega\{j\}$, $\langle\dot{\phi}^2\rangle$, ϕ^2 i $\omega\{n\}$. Delom koji zavisi od potencijala nećemo se u ovom radu detaljnije baviti. Deo LMTO metoda koji zavisi od strukture kristala su strukturne konstante, koje smo definisali relacijom (3.39). Kasnije ćemo videti da će pogodnom aproksimacijom ove strukturne konstante postati invarijantne na uniformnu promenu skale rešetke. To nam omogućava da ih za jedan tip kristalne rešetke izračunamo, tabeliramo i koristimo bez obzira na veličinu parametara elementarne ćelije te rešetke. U literaturi ovakve strukturne konstante zovu kanonskim. Osobine strukturnih konstanti, kao i kompjutersko izračunavanje njihovih matrica detaljno ćemo opisati u sledeće dve glave ovog rada.

3.3. Aproksimacija atomskih sfera (ASA)

U ASA se pretpostavlja sledeće:

a) $S_{MT}=S$

b) $\varkappa^2=0$.

Znači, MT sferu zamenjujemo atomskom sferom koja ima istu zapreminu kao atomski poliedar, pa intersticijalna oblast nestaje. Tada možemo proizvoljno birati kinetičku energiju $\varkappa^2$. U ASA se uzima $\varkappa^2=0$. Ovakav izbor kinetičke energije obezbeđuje da strukturne konstante postanu invarijantne na uniformnu promenu skale kristalne rešetke. U LMTO - ASA integracije se vrše po atomskoj sferi, pri čemu se doprinos integralima koji potiče od oblasti između MT sfere i atomske sfere obračunava posebno.

Kada pređemo u limes $\varkappa^2=0$, fazni pomeraj (3.11) divergira, pa MTO više nisu dobro definisane relacijama (3.24) - (3.26). Ovde ćemo predstaviti proširene, energetski nezavisne MTO koje se mogu koristiti u LMTO metodu u ASA aproksimaciji. One su date sledećim izrazima [9]:

$$\chi_L(\vec{r}) = i^l \, Y_l^m(\hat{\vec{r}}) \begin{cases} \dfrac{\phi_l(-l-1,r)}{\sqrt{\frac{S}{2}}\,\phi_l(-l-1)} \, , & r \le S \\[2ex] \dfrac{N(\frac{r}{S})}{\sqrt{\frac{S}{2}}} \, , & r \le S \end{cases} \tag{3.43}$$

$$J_l(r) = \begin{cases} \dfrac{\phi_l(l,r)}{\sqrt{\frac{S}{2}}\,\phi_l(l)} \, , & r \le S \\[2ex] \dfrac{(\frac{r}{S})^l}{\sqrt{\frac{S}{2}}} \, , & r \ge S \end{cases} \tag{3.44}$$

Vidimo da je normiranje funkcija $\chi_l(r)$ i $J_l(r)$ takvo da im je amplituda na granici sfere jednaka $\sqrt{\frac{2}{S}}$. Ovakvo normiranje potrebno je da bi se iz MT orbitala u ASA dobila LMTO matrica konzistentna matrici (3.40) - (3.42) u ASA. Proširenu sfernu Neumann-ovu funkciju, koja se pojavljuje u (3.43) za $\varkappa^2=0$, definišemo na sledeći način [9]:

$$N_l\left(\frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{S}\right) i^l \; Y_l^m(\widehat{\vec{r}-\vec{R}}) = \begin{cases} -\sum_{L'} \frac{\phi_{L'}(l',\vec{r}-\vec{R}')}{2(2l'+1)\phi_{l'}(l')}\, g_{L'L}\left(\frac{S}{|\vec{R}-\vec{R}'|}\right)^{l''+1} \times \\ \times\, [4\pi\, i^{l''} Y^{m''}_{l''}(\widehat{\vec{R}-\vec{R}'})]^{*} & \begin{cases} \text{za } |\vec{r}-\vec{R}'| \le S \\ \forall \vec{R}' \neq \vec{R} \end{cases} \\ \left(\frac{|\vec{r}-\vec{R}|}{S}\right)^{-l-1} & \text{u ostalim slučajevima} \end{cases}$$

(3.45)

U ovim formulama korišćene su skraćene oznake, pa $\phi_l(l,r)$ označava funkciju $\phi_l(D,r)$ za $D=l$ itd. Koeficijenti $g_{L'L}$ ulaze u definiciju kanonskih strukturnih konstanti.

4. OSOBINE STRUKTURNIH KONSTANTI

4.1. Teorema o razvoju repova MTO

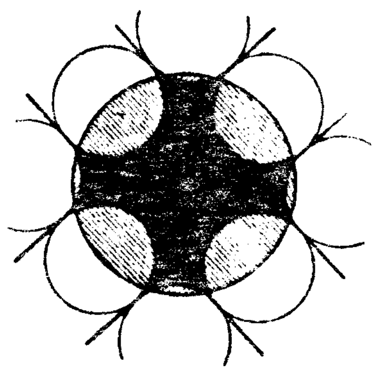
U ovom poglavlju ćemo se upoznati sa teoremom koju ćemo koristiti pri objašnjavanju osobina strukturnih konstanti.

Jedan od razloga što smo repove MTO birali kao rešenja translaciono invarijantne Helmholtz-ove jednačine (3.7) je jednostavna teorema o razvoju koju ove funkcije zadovoljavaju [11]. Ova teorema tvrdi da se rep MTO (3.13), tj. sferna Neumann-ova funkcija centrirana u položaju $\vec{R}$, može napisati kao razvoj po Bessel-ovim funkcijama centriranim u $\vec{R}'$, na sledeći način:

$$n_L(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}) = 4\pi \sum_{L'} \sum_{L''} C_{LL'L''} \; j_{L'}(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}')\; n^*_{L''}(\varkappa,\vec{R}-\vec{R}'). \qquad (4.1)$$

U gornjoj formuli indeksom L označeno je da su sve funkcije oblika (3.5).

Ovakav razvoj važi unutar sfere centrirane u $\vec{R}'$ koja prolazi kroz $\vec{R}$, tj. kada je $|\vec{r} - \vec{R}'| < |\vec{R} - \vec{R}'|$.



Sl. 4.1.
Na slici su date oblast konvergencije za teoremu o razvoju (šrafirana oblast) i oblast konvergencije za razvoj oko jednog centra (3.29) (crna površina).

Veličine $C_{LL'L''}$ zovu se Gaunt-ovi koeficijenti i definisani su relacijom (3.31). Ovi koeficijenti su različiti od nule samo u sledećim slučajevima:

$$m'' = m' - m$$
$$l'' = |l-l'|,\ |l-l'|+2, \dots, l+l'. \qquad (4.2)$$

Obično se koristi nešto jednostavnija varijanta teoreme (4.1), u kojoj je $\vec{R}'=0$:

$$n_L(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}) = 4\pi \sum_{L'} \sum_{L''} C_{LL'L''}\ j_{L'}(\varkappa,\vec{r})\ n^*_{L''}(\varkappa,\vec{R}) \qquad (4.3)$$

Sada teorema tvrdi da se repovi MTO (3.13) centrirani u $\vec{R}$ mogu razviti po funkcijama $j_{L'}(\varkappa,\vec{r})$ centriranim u koordinatnom početku. Razlog za formu $j_{L'}(\varkappa\vec{r}) = j_{l'}(\varkappa,r)\ i^{l'} Y^{m'}_{l'}(\hat{\vec{r}})$ je taj što će sada unutar sfere oko koordinatnog početka repovi od ostalih sfera imati isti oblik kao izraz proporcionalan $\cot(\eta_l)$ u (3.13).

4.2. KKR strukturne konstante

U ovom ćemo poglavlju dokazati da se policentrični razvoj MTO (3.28) može zameniti razvojem oko jednog centra (3.29). Iz ovog dokaza ćemo izvesti izraz za KKR strukturne konstante (3.30) i dokazati ermitovost matrice ovih konstanti.

Izraz (3.28) može se napisati u sledećem obliku:

$$\chi^{\vec{k}}_L(E,\varkappa,\vec{r}) = \chi_L(E,\varkappa,\vec{r}) + \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \chi_L(E,\varkappa,\vec{r}-\vec{R}), \qquad (4.4)$$

gde je drugi sabirak suma repova MTO centriranih u svim čvorovima kristalne rešetke, osim u koordinatnom početku. Ovaj član se, tada, može napisati kao:

$$\sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \chi_L(E,\varkappa,\vec{r}-\vec{R}) = \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \varkappa N_L(\varkappa,\vec{r}-R) = \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \varkappa n_L(\varkappa,\vec{r}-\vec{R})$$

(4.5)

pri čemu smo koristili izraze (3.24) i (3.25). Primenimo li teoremu o razvoju repova MTO (4.3), dobićemo:

$$\sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varkappa\, n_L(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}) = \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varkappa\, 4\pi \sum_{L'}\sum_{L''} C_{LL'L''}\, j_{L'}(\varkappa,\vec{r})\, n^{*}_{L''}(\varkappa,\vec{R}) \tag{4.6}$$

odakle sledi:

$$\chi^{\vec{k}}_{L}(E,\varkappa,\vec{r}) = \chi_L(E,\varkappa,\vec{r}) + \sum_{L'} j_{L'}(\varkappa,\vec{r})4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varkappa n^{*}_{L''}(\varkappa,\vec{R}) \tag{4.7}$$

Ako u ovaj izraz uvedemo strukturne konstante definisane relacijom (3.30) i iskoristimo izraz (3.26), po kome izvan MT sfere važi: $j_{L'}(\varkappa,\vec{r}) = J_{L'}(\varkappa,\vec{r})$, dobijamo razvoj oko jednog centra (3.29).

Oblast konvergencije ovog razvoja, koja je data na Sl.4.1. sledi iz činjenice da teorema o razvoju (4.3) važi u sferi koja prolazi kroz susedne čvorove, dok su repovi orbitala definisani samo izvan svojih MT sfera.

KKR strukturne konstante (3.30) predstavljaju koeficijente razvoja repova MTO oko jednog centra. One ne zavise od potencijala, a matrica $B^{\vec{k}}_{l'm',lm}$ je ermitska, što ćemo sada dokazati.

Prisetimo se osobina sfernih harmonika:

$$Y^m_l(-\hat{\vec{R}}) = (-1)^l\, Y^m_l(\hat{\vec{R}}) \tag{4.8}$$

$$Y^m_l(\hat{\vec{R}})^{*} = (-1)^m\, Y^{-m}_l(\hat{\vec{R}}). \tag{4.9}$$

Iskoristimo ove osobine da dokažemo sledeću relaciju:

$$(-1)^{m''} C^{*}_{l'm',lm,l''-m''} = C_{lm,l'm',l''m''} \equiv C_{LL'L''} \tag{4.10}$$

gde su $C_{LL'L''}$ definisani izrazom (3.31). Iz ove definicije sledi:

$$(-1)^{m''} C^*_{l'm',lm,l''-m''} = (-1)^{m''} \left[\int Y^{m'}_{l'}(\hat{\varkappa})\, Y^{m\,*}_{l}(\hat{\varkappa})\, Y^{-m''}_{l''}(\hat{\varkappa}) d\hat{\varkappa} \right]^*.$$

Ako konjugujemo desnu stranu, dobićemo:

$$(-1)^{m''} C^*_{l'm',lm,l''-m''} = (-1)^{m''} \int Y^{m'\,*}_{l'}(\hat{\varkappa})\, Y^{m}_{l}(\hat{\varkappa})\, Y^{-m''\,*}_{l''}(\hat{\varkappa}) d\hat{\varkappa} =$$

$$= (-1)^{m''} \int Y^{m}_{l}(\hat{\varkappa})\, Y^{m'\,*}_{l'}(\hat{\varkappa})\, (-1)^{-m''}\, Y^{m''}_{l''}(\hat{\varkappa})\, d\hat{\varkappa} = C_{LL'L''} ,$$

pri čemu smo koristili konjugovanu relaciju (4.9).

Da bi matrica KKR strukturnih konstanti bila ermitska, mora biti ispunjen sledeći uslov:

$$B^{\vec{k}\,*}_{LL'}(\varkappa) = B^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa). \tag{4.11}$$

Konjugujmo relaciju (3.30) i zamenimo mesta indeksima L i L' :

$$B^{\vec{k}\,*}_{LL'}(\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} C^*_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{-i\vec{k}\vec{R}}\, \varkappa\, n_{L''}(\varkappa,\vec{R}). \tag{4.12}$$

Izvršimo, zatim, smenu $\vec{R} \longrightarrow -\vec{R}$ i setimo se da kristal poseduje centar inverzije, zbog čega važi: $\sum_{\vec{R}} = \sum_{-\vec{R}}$. Tako dobijamo sledeći izraz:

$$B^{\vec{k}\,*}_{LL'}(\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} C^*_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\, \varkappa\, n_{L''}(\varkappa,-\vec{R}). \tag{4.13}$$

Pogledajmo malo detaljnije sfernu Neumann-ovu funkciju:

$$n_{L''}(\varkappa,-\vec{R}) = i^{l''}\, Y^{m''}_{l''}(-\hat{\vec{R}})\, n_{l''}(\varkappa R).$$

Iskoristimo li osobine sfernih harmonika (4.8) i (4.9):

$$n_{L''}(\varkappa,-\vec{R}) = i^{l''}(-1)^{l''}\, Y^{m''}_{l''}(\hat{\vec{R}})\, n_{l''}(\varkappa R) =$$

$$= (-i)^{l''}(-1)^{m''}\, Y^{-m''\,*}_{l''}(\hat{\vec{R}})\, n_{l''}(\varkappa R),$$

dobićemo sledeći izraz:

$$n_{L''}(\varkappa,-\vec{R}) = (-1)^{m''} n^{*}_{l'',-m''}(\vec{R}),$$

koji ćemo vratiti u (4.13). Ako pri tome izvršimo smenu $m'' \longrightarrow -m''$, dobićemo:

$$B^{\vec{k}\,*}_{L L'}(\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} (-1)^{m''} C^{*}_{l'm',lm,l''-m''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\varkappa\, n^{*}_{L''}(\hat{\vec{R}}).$$

Zamenom izraza (4.10) u gornju relaciju, pokazali smo da je ispunjen uslov (4.11) ermitovosti matrice $B^{\vec{k}}_{L'L}$.

4.3. Kanonske strukturne konstante

Pri izvođenju LMTO sekularne matrice uveli smo strukturne konstante $S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)$ relacijom (3.39). To smo uradili da bi sekularna matrica bila dobro definisana i u ASA, kada je $\varkappa^2=0$. Naime, KKR strukturne konstante divergiraju u tački $\varkappa^2=0$. Ako u definiciji (3.30) zamenimo asimptotiku sferne Neumann-ove funkcije (3.8), dobija se:

$$\lim_{\varkappa\to 0} B^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\left(-\frac{(2l''-1)!!}{R^{l''+1}}\right)\lim_{\varkappa\to 0}\frac{\varkappa}{\varkappa^{l''+1}} .$$

Kako je l'' pozitivna veličina, divergentnost KKR strukturnih konstanti u ASA je pokazana. Ispitajmo sada ponašanje strukturnih konstanti $S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)$ u istoj tački:

$$\lim_{\varkappa\to 0} S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \lim_{\varkappa\to 0} \frac{\varkappa\, n^{*}_{L''}(\varkappa R)}{\frac{\varkappa^2 S}{2}\, n_{l'}(\varkappa S)\, n_{l}(\varkappa S)}$$

Iz asimptotike (3.8) sledi:

$$\lim_{\varkappa\to 0} S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa) = 4\pi \sum_{L''} C_{LL'L''} \left(-\frac{(2l''-1)!!}{(2l'-1)!!\,(2l-1)!!}\right) \times$$

$$\times \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \left[i^{l''} Y_{l''}^{m''}(\hat{\vec{R}}) \right]^* \frac{S^{l'+l+1}}{R^{l''+1}} \lim_{\varkappa\to 0} \varkappa^{l'+l-l''} . \qquad (4.14)$$

Zbog osobine Gaunt-ovih koeficijenata, $C_{LL'L''}$, da su različiti od nule samo za vrednosti date izrazima (4.2), možemo pisati:

$$\lim_{\varkappa\to 0} \varkappa^{l'+l-l''} = \delta_{l'',\, l+l'} \qquad (4.15)$$

i tvrditi da su strukturne konstante $S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)$ regularne za tačku $\varkappa^2=0$.

Već smo dokazali da je matrica $B^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)$ ermitska. Iz ovoga i činjenice da su koeficijenti te matrice u izrazu (3.39) podeljeni realnom funkcijom, simetričnom na izmenu mesta indeksa l i l', lako se zaključuje da je i matrica $S^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)$ ermitska.

Posmatrajmo sada Bloch-ovu sumu repova MTO i primenimo na nju teoremu o razvoju, (4.3):

$$\sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \varkappa\, n_L(\varkappa,\vec{r}-\vec{R}) = \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} 4\pi \sum_{L'L''} C_{LL'L''}\, j_{L'}(\varkappa,\vec{r}) \varkappa\, n^*_{L''}(\varkappa,\vec{R}). \qquad (4.16)$$

Zbog asimptotike (3.8), ovaj izraz dobija oblik:

$$\sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \frac{i^l Y_l^m(\widehat{\vec{r}-\vec{R}})}{|\vec{r}-\vec{R}|^{l+1}} = 4\pi \sum_{L'L''} C_{LL'L''} \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}}\, i^{l'} Y_{l'}^{m'}(\hat{\vec{r}})\, r^{l'} \times$$

$$\times \frac{\left[i^{l''} Y_{l''}^{m''}(\hat{\vec{R}}) \right]^*}{R^{l''+1}} \frac{(2l''-1)!!}{(2l'+1)!!\,(2l-1)!!} \delta_{l'',\, l'+l}. \qquad (4.17)$$

pri čemu smo iskoristili relaciju (4.15). Pošto su koeficijenti $C_{LL'L''}$ različiti od nule samo za $m''=m'-m$, u gornjem će izrazu nestati suma po L''. Ako pomnožimo ovu jednačinu sa $S^{l+1}= S^{l''-l+1}$, dobićemo razvoj oblika:

$$\sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \left(\frac{S}{|\vec{r}-\vec{R}|}\right)^{l+1} i^{l} Y_{l}^{m}(\widehat{\vec{r}-\vec{R}}) = \sum_{L'} \frac{-1}{2(2l'+1)} \left(\frac{r}{S}\right)^{l'} i^{l'} Y_{l'}^{m'}(\hat{\vec{r}})\, S^{\vec{k}}_{L',L} \,. \tag{4.18}$$

Koeficijenti razvoja, $S^{\vec{k}}_{L',L}$ su kanonske strukturne konstante i dati su sledećim izrazima [13]:

$$S^{\vec{k}}_{l'm',lm} = g_{l'm',lm}\, \Sigma^{\vec{k}}_{\lambda\mu} \tag{4.19}$$

$$\lambda = l' + l; \quad \mu = m' - m$$

$$\Sigma^{\vec{k}}_{\lambda\mu} \equiv \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} \left(\frac{S}{R}\right)^{\lambda+1} \left[\sqrt{4\pi}\, i^{\lambda}\, Y_{\lambda\mu}(\hat{\vec{R}})\right]^{*} \tag{4.20}$$

$$g_{l'm',lm} = \frac{-2\,(2\lambda-1)!!}{(2l'-1)!!\,(2l-1)!!}\,(2\lambda+1)^{1/2}\, c^{\lambda}(l'm',lm) =$$

$$= (-1)^{m+1}\, 2 \left[\frac{(2l'+1)\,(2l+1)}{2\lambda+1}\,\frac{(\lambda+\mu)!\,(\lambda-\mu)!}{(l'+m')!\,(l'-m')!\,(l+m)!\,(l-m)!}\right]^{1/2} \tag{4.21}$$

pri čemu važi: $(-1)!!=1$.

Faktor $[2(2l'+1)]^{-1}$ se pojavljuje, u formuli (4.18), da bi $S^{\vec{k}}_{L',L}$ bila ermitska matrica.

Poređenjem izraza (4.14) i (4.19) vidi se da se kanonske strukturne konstante mogu izraziti na sledeći način:

$$S^{\vec{k}}_{L',L} = \lim_{\varkappa\to 0} \frac{B^{\vec{k}}_{L',L}(\varkappa)}{\sqrt{\frac{S}{2}}\,\varkappa\, n_{l'}(\varkappa S)\, \sqrt{\frac{S}{2}}\,\varkappa\, n_{l}(\varkappa S)} \,. \tag{4.22}$$

Najvažnije dve osobine po kojima se kanonske strukturne konstante razlikuju od ostalih su:

a) ne zavise od energije $E = \varkappa^2 + V_{MTZ}$ i

b) za $\varkappa^2=0$ invarijantne su na uniformnu promenu skale rešetke.

Dalje, polovi $(|\vec{k} + \vec{G}|^2 - \varkappa^2)^{-1}$ KKR strukturnih konstanti se redukuju na singularitete u čvorovima recipročne rešetke. Važi [13]:

$$\Sigma^{\vec{k}}_{\lambda\mu} \underset{k\to 0}{\sim} (kS)^{\lambda-2}$$

tako da ss i sp strukturne konstante divergiraju, pp strukturne konstante imaju prekid u centru Brillouin-ove zone, dok $B^{\vec{k}}_{L'L}(\varkappa)$ imaju singularitete za sve tačke na paraboli slobodnog elektrona. Znači, u (4.19) nema sume po l'' kao u (3.30), a Gaunt-ovi koeficijenti (4.21) su zbog $l''=l'+l$ relativno jednostavni.

Lako se može pokazati da razvoj (4.4) za MTO u ASA (3.43) - (3.45) ima sledeći oblik:

$$\chi^{\vec{k}}_{L}(\vec{r}) = \frac{\phi_L(-l-1,\vec{r})}{\sqrt{\frac{S}{2}}\,\phi_l(-l-1)} \sum_{L'} \frac{\phi_{L'}(l',\vec{r})}{2(2l'+1)\sqrt{\frac{S}{2}}\;\phi_{l'}(l)} S^{\vec{k}}_{L'L} \,. \tag{4.23}$$

Ovo je razvoj koji se koristi za izvođenje LMTO sekularne matrice u ASA. Matrica koja se dobija na ovaj način, istovetna je sa matricom koju dobijamo kada na (3.40) - (3.42) primenimo ASA.

4.4. Ewald-ova procedura za izračunavanje strukturnih konstanti

Izračunavanje kanonske strukturne konstante (4.19) u slučaju kristala sa više atoma po primitivnoj ćeliji uključuje izračunavanje sume rešetke oblika:

$$\Sigma^{\vec{k}}_{\lambda\mu} = \sum_{\vec{\Delta}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{\Delta}} \left(\frac{S}{\Delta}\right)^{\lambda+1} \left[\sqrt{4\pi}\, i^{\lambda}\, Y_{\lambda\mu}(\hat{\Delta})\right]^{*} \tag{4.24}$$

gde je $\vec{\Delta} = \vec{R} - \vec{\delta}$, a $\vec{\delta}$ je vektor koji precizira položaj atoma unutar primitivne ćelije. Naravno, za slučaj jednog atoma po primitivnoj ćeliji $\vec{\delta}=0$.

Ovo sumiranje se može uraditi direktno, u realnom prostoru, ali za $l \leq 4$ veliki deo sume se mora razvijati posebno, Furije transformacijom. Zato ćemo ovo sumiranje izvršiti na drugi način, pomoću standardne Ewald-ove procedure [14]. U ovoj se proceduri činilac $(\frac{1}{\Delta})^{\lambda+1}$ iz formule (4.24) zamenjuje izrazom $\frac{\Delta^{\lambda}}{\Delta^{2\lambda+1}}$. Zatim se imenilac ovog izraza transformiše na sledeći način:

$$\frac{1}{\Delta^{2\lambda+1}} = \frac{2^{\lambda+1}}{\sqrt{\pi}\ (2\lambda-1)!!}\ J_{2\lambda} \tag{4.25}$$

gde je:

$$J_{2\lambda} = \int_0^{\infty} \xi^{2\lambda}\ e^{-\Delta^2\xi^2}\ d\xi, \qquad (-1)!!=1. \tag{4.26}$$

Gornja transformacija lako se pokazuje uzastopnim diferenciranjem izraza: $\int_0^{\infty} e^{-\alpha\xi^2} d\xi = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$, po α, a zatim smenom $\alpha=\Delta^2$.

Dalje se interval integracije podeli na oblasti $(0,\gamma)$ i (γ,∞) i suma rešetke (4.24) predstavi u sledećem obliku:

$$\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2 \tag{4.27}$$

$$\Sigma_1 = \frac{4(-2i)^{\lambda}\ S^{\lambda+1}}{(2\lambda-1)!!} \sum_{\vec{\Delta}\neq 0} \int_0^{\gamma} d\xi\ \xi^{2\lambda}\ e^{-\Delta^2\xi^2}\ e^{i\vec{k}\vec{\Delta}}\ \Delta^{\lambda}\ Y^{*}_{\lambda\mu}(\hat{\Delta}) \tag{4.28}$$

$$\Sigma_2 = \frac{4(-2i)^{\lambda}\ S^{\lambda+1}}{(2\lambda-1)!!} \sum_{\vec{\Delta}\neq 0} \int_{\gamma}^{\infty} d\xi\ \xi^{2\lambda}\ e^{-\Delta^2\xi^2}\ e^{i\vec{k}\vec{\Delta}}\ \Delta^{\lambda}\ Y^{*}_{\lambda\mu}(\hat{\Delta}). \tag{4.29}$$

Nadalje nas interesuje slučaj jednog atoma po primitivnoj ćeliji, kada je $\vec{\delta}$=0. Sumu (4.28) možemo napisati na sledeći način:

$$\Sigma_1 = \frac{4(-2i)^\lambda S^{\lambda+1}}{(2\lambda - 1)!!} \left\{ \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}(\vec{R}-\vec{\delta})} (|\vec{R} - \vec{\delta}|)^\lambda Y^*_{\lambda\mu} (\widehat{|\vec{R} - \vec{\delta}|}) \times \right.$$

$$\left. \times \int_0^\gamma d\xi\, \xi^{2\lambda} e^{-|\vec{R}-\vec{\delta}|^2\xi^2} + e^{i\vec{k}\vec{\delta}} \delta^\lambda Y^*_{\lambda\mu} (\hat{\delta}) \int_0^\gamma d\xi\, \xi^{2\lambda} e^{-\delta^2\xi^2} \right\}. \tag{4.30}$$

Ako sada u gornjem izrazu pustimo da $\vec{\delta} \to 0$, dobićemo:

$$\lim_{\vec{\delta}\to 0} \Sigma_1 = \frac{4(-2i)^\lambda S^{\lambda+1}}{(2\lambda-1)!!} \left\{ \sum_{\vec{R}\neq 0} e^{i\vec{k}\vec{R}} R^\lambda Y^*_{\lambda\mu} (\hat{R}) \int_0^\gamma d\xi\, \xi^{2\lambda} e^{-R^2\xi^2} + \right.$$

$$\left. + \lim_{\delta\to 0} e^{i\vec{k}\vec{\delta}} \delta^\lambda Y^*_{\lambda\mu} (\hat{\delta}) \int_0^\gamma d\xi\, \xi^{2\lambda} e^{-\delta^2\xi^2} \right\} \tag{4.31}$$

Posmatrajmo drugi sabirak prethodnog izraza i uvedimo smenu $y=\delta\xi$:

$$\lim_{\vec{\delta}\to 0} \delta^\lambda \int_0^\gamma d\xi\, \xi^{2\lambda} e^{-\delta^2\xi^2} = \lim_{\vec{\delta}\to 0} \delta^{-\lambda-1} \int_0^{\gamma\delta} dy\, y^{2\lambda} e^{-y^2} =$$

$$= \lim_{\vec{\delta}\to 0} \delta^{-\lambda-1} \int_0^{\gamma\delta} dy\, y^{2\lambda} (1-y^2), \tag{4.32}$$

odakle se dobija:

$$\lim_{\vec{\delta}\to 0} \delta^\lambda \int_0^\gamma d\xi\, \xi^{2\lambda} e^{-\delta^2\xi^2} = \lim_{\vec{\delta}\to 0} \left\{ \frac{\gamma^{2\lambda+1}}{2^{\lambda+1}} \delta^\lambda + \frac{\gamma^{2\lambda+3}}{2\lambda + 3} \delta^{\lambda+2} \right\} = \gamma\delta_{\lambda,0}. \tag{4.33}$$

Suma rešetke (4.24) data je izrazima (4.33), (4.31) i (4.29). U izrazu (4.29) oblast integracije dopušta direktnu smenu $\vec{\Delta}=\vec{R}$.

Parametar γ određuje se iz uslova najbolje konvergencije suma Σ_1 i Σ_2 i dat je sledećim izrazom [14]:

$$\gamma = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt[3]{\Omega}}\,\alpha, \qquad (4.34)$$

gde je α množitelj za koga se pokazalo da je za bcc strukturu u intervalu 1.1 - 1.3.

5. PROGRAMI I REZULTATI

5.1. Paket programa LMTO

Sada ćemo ukratko predstaviti paket programa LMTOPACK, zasnovan na opisanoj metodi linearnih MTO. LMTOPACK je skup fortranskih programa prilagođenih za rad na računarima tipa VAX, koji služi za izračunavanje zonske strukture datog kristala. Osnovu paketa čine četiri programa: STR, LMTO, DDNS i SCFC koji se koriste za određivanje, redom: strukturnih konstanti, svojstvenih vrednosti energije, gustine stanja i različitih veličina vezanih za kristal u osnovnom stanju. Pored nabrojanih, paket sadrži pomoćne programe koji korisniku pružaju različite mogućnosti predstavljanja rezultata, kao i programe za izračunavanje parametara potrebnih za uspešan rad glavnih programa.

Spisak programa sadržanih u paketu dat je u Tabeli 5.1, a šema povezanosti programa i protoka informacija prilikom tipične primene paketa prikazana je na Sl. 5.1.

5.2. Program za strukturne konstante STR

Program STR izračunava kanonske strukturne konstante opisane u Gl.4. U tipičnoj primeni paketa programa LMTOPACK, ovaj program se pušta samo jednom za datu kristalnu strukturu. Izračunate matrice strukturnih konstanti, u nizu izabranih $\vec{k}$ tačaka ireducibilnog dela Brillouin-ove zone, smeštaju se u posebnu datoteku STR2.DSK na disku. Kada se u primeni naiđe na takvu kristalnu strukturu, dovoljno je samo pozvati podatke iz ove datoteke za rešavanje svojstvenog problema u programu

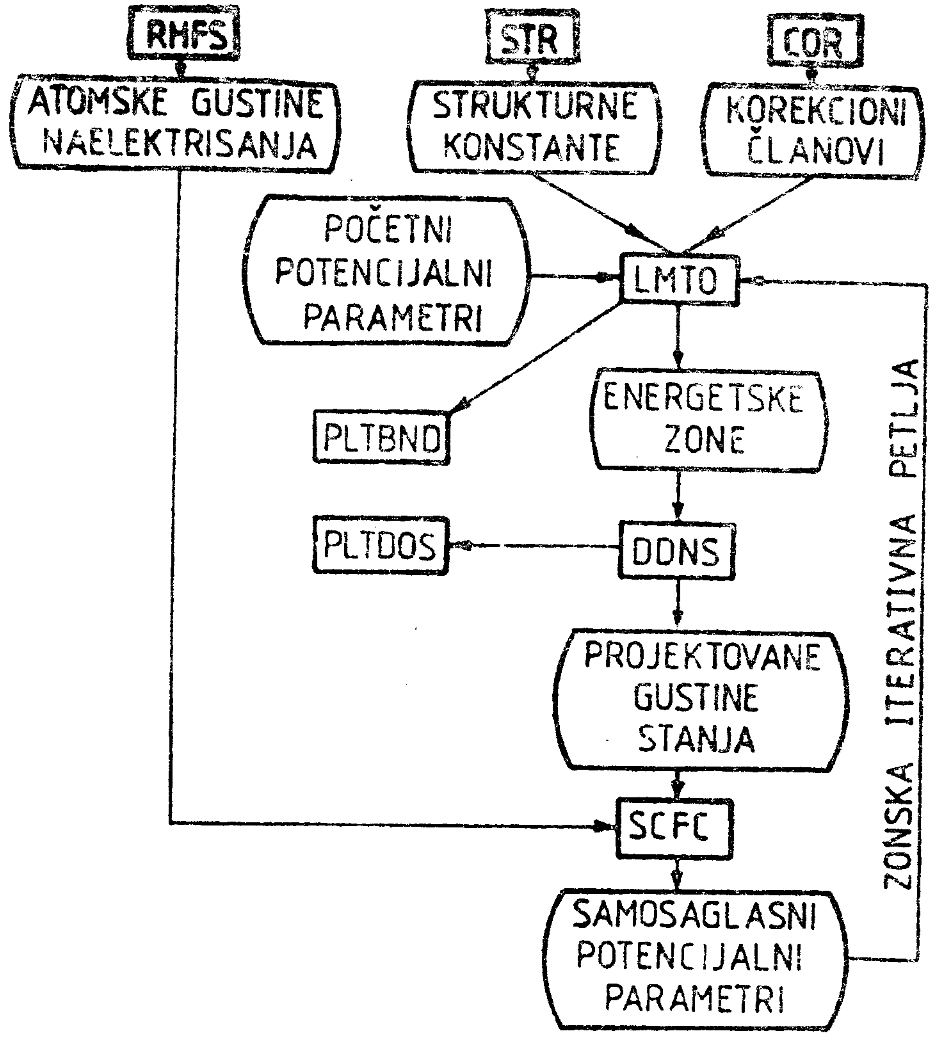
N A Z I V	F U N K C I J A
CANON	**Izračunavanje kanonske i nehibridizovane zone**
COR	Generira korekcije na strukturne konstante
DDNS	Izračunava l-te projekcije i ukupne gustine stanja i l-te projekcije i ukupne brojeve stanja
FSAR	Izračunava ekstremne površine i efektivne mase na Fermi površi
JDNS	Izračunavanje povezane gustine stanja
LMTO	Izračunavanje energetske zone
PLTBND	Crta energetske zone
PLTDOS	Crta gustine stanja
READB	Crta i štampa skupove podataka za energetske zone
KHFS	Generiše atomske i zamrznute-ljuske gustine naelektrisanja
SCFC	Izračunava samosaglasno potencijalne parametre i svojstva osnovnog stanja
STR	Generiše strukturne konstante
TDNS	Izračunava samo ukupnu gustinu stanja

Tabela 5.1. Spisak programa iz paketa LMTOPACK

LMTO.

Ulaz u program STR (smešten u datoteku STR2.DAT) kao osnovni podatak sadrži tri bazisna vektora, koji određuju elementarnu ćeliju realnog prostora i koordinate atoma u elementarnoj ćeliji.

Izlaz iz progrma STR sastoji se od kanonskih strukturnih konstanti koje se koriste u programima CANON i LMTO (vidi



Sl 5.1. Ilustracija programa i protoka informacija za samosaglasni LMTO proračun

Tabelu 5.1) za izračunavanje (nehibridizovanih i hibridizovanih) zonskih struktura. Uz strukturne matrice, ovaj program za izlazne podatke ima i podatke o vektorima realnog i recipročnog prostora, koji su potrebni programu COR.

Izgled jedne od mogućih ulaznih datoteka za STR dat je na Sl.5.2.

Prva linija podataka je tekst koji daje informaciju o tipu rešetke. Taj će tekst, kao i ostali bitni podaci, biti

Sl. 5.2. Datoteka STR2.DAT

prenet u sve ostale programe.

Prva dva broja u drugoj liniji su veličine AMAX i BMAX. Pomoću njih se izračunavaju radijusi sfera u diskretnom (RMAX) i inverznom (GMAX) prostoru, iz sledećih relacija:

AMAX = RMAX * ALAMDA

BMAX = GMAX / 2. * ALAMDA,

gde je ALAMDA veličina koja je određena brzinom konvergencije sume u strukturnoj konstanti. Tako vektori RMAX i GMAX predstavljaju kompromis između dobre konvergencije i kratkog vremena izvršavanja programa. Sa povećanjem ovih radijusa poboljšava se konvergencija suma, ali se povećava vreme rada programa.

Sledeća tri broja u istoj liniji određuju na koji način će program raditi. Prvi broj može imati tri vrednosti sa sledećim značenjima:

0 - daje skraćeni ispis rezultata

1 - ispisivanje vektora potrebnih programu COR

2 - ispisivanje matrice strukturnih konstanti.

Sledećim brojem regulišemo hoće li program uraditi test konvergencije (ICNVRG=1) i odrediti najoptimalniju vrednost veličine ALAMDA, ili će ALAMDA biti učitana kao ulazni podatak (ICNVRG=0). Obično se pri prvom puštanju u rad programa za neku strukturu stavi ICNVRG=1, a pri svim ostalim, zbog skraćenja rada programa, učitava veličina ALAMDA dobijena iz testa konvergencije.

Trećim brojem određujemo hoće li se vektori primitivne ćelije čitati iz ulazne datoteke (IPRIM=0) ili će se generisati u programu (IPRIM=1).

Treća linija ulazne datoteke sadrži tri broja. Prvi, NL=4, reći će programu da treba da razmotri s,p,d, i f elektrone. Drugi, NQ=1, je broj atoma po primitivnoj ćeliji. Treći broj je vrednost za ALAMDA, određena pomoću testa za konvergenciju.

Četvrta linija sadrži oznaku za tip strukture (LAT=3 za bcc strukturu), pomoću koje se vrši selekcija Brillouin-ovih zona prema tabeli u potprogramu MESH.

Sledeće dve linije sadrže veličine osa i uglova elementarne ćelije. Za bcc strukturu, za koju smo izračunali matricu strukturnih koeficijenata, te su veličine:

$a = b = c = 1$

$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Sledi NQ linija koje daju položaje atoma u elementarnoj ćeliji.

Poslednja linija ulazne datoteke sadrži četiri broja: MODE, NPX, NPY i NPZ. Za MODE=0, tri broja koja slede služe da odrede mrežu tačaka u $\vec{k}$ prostoru. Oni označavaju broj tačaka duž osa inverznog prostora. Kada je MODE=1, NPX daje broj tačaka visoke simetrije u kojima će se odredivati zonska struktura. Zatim bi trebalo da sledi NPX linija sa koordinatama i oznakama tih podataka, pri čemu se mora paziti da se centar Brillouin-ove zone (Γ tačka) zada u obliku $\frac{\pi}{a}$ (o.,0.,0.01) zbog divergentnosti nekih strukturnih konstanti u koordinatnom početku.

Program se pokreće sledećom upravljačkom rutinom, smeštenom u datoteku STR2.COM:

```
$ FOR/G_FLOATING STR2
$ LINK STR2
$ RUN STR2
```

Prvom naredbom vrši se prevođenje programa, drugom se prevedeni program pretvara u povezani ili izvodljivi oblik. Tom prilikom se vrši i spajanje programa sa svim potrebnim potprogramima. Poslednjom naredbom pokreće se izvršenje programa.

U nastavku ćemo dati listing programa STR.

5.3. Rezultati

Ovde ćemo priložiti listing izlaznih podataka. Na početku listinga date su neke ulazne veličine kao i konstante koje program iz njih izračunava i koristi u daljem radu. Dalje je dat skraćeni ispis rezultata potprograma VECGEN koji generiše vektore direktnog i inverznog prostora iz vektora translacije primitivne ćelije, datih u jedinicama a.

Zatim su priložene matrice strukturnih konstanti za tri Bloch-ova vektora $\vec{k}$. Ovde je dat samo deo izlaza iz programa STR. Ceo izraz sadrži 285 strukturnih matrica.

```
STR FOR :   STRUCTURE CONSTANTS FOR BCC LATTICE              NEW

AMAX    4.50000 BMAX    4.50000
RMAX    2.57143 GMAX   15.75000
NL    4 NQ    1 NLM   16 LMQ   16
LAMDA    1.75000
NOWRT    2 ICNVRG    0 IPRIM   1


A,B,C  1.000000  1.000000  1.000000
ALPHA,BETA,GAMMA 90.0000 90.0000 90.0000


PRIMITIVE VECTORS IN UNIT CELL OF  BCC

BOA   1.0000000000  COA   1.0000000000


 (    0.50000,   0.50000,  -0.50000 )
 (   -0.50000,   0.50000,   0.50000 )
 (    0.50000,  -0.50000,   0.50000 )


BASIS VECTORS


 (    0.00000,   0.00000,   0.00000 )


PRIMITIVE VECTORS OF RECIPROCAL SPACE
IN UNITS OF 2*PI/A

(    1.00000,   1.00000,   0.00000)

(    0.00000,   1.00000,   1.00000)

(    1.00000,   0.00000,   1.00000)


R1     0.0000 RA     2.5714
G1     6.2900 GA    22.0400

NUMR    9 NUMG    9
```

RESULT FROM VECGEN FOR REAL SPACE VECTORS

NO	SX	SY	SZ	D
1	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

SHELL NUMBER 1 WITH 1 POINTS

2	-0.500000	-0.500000	-0.500000	0.866025
3	-0.500000	-0.500000	0.500000	0.866025
4	0.500000	-0.500000	-0.500000	0.866025
5	-0.500000	0.500000	-0.500000	0.866025
6	0.500000	-0.500000	0.500000	0.866025
7	-0.500000	0.500000	0.500000	0.866025
8	0.500000	0.500000	-0.500000	0.866025
9	0.500000	0.500000	0.500000	0.866025

SHELL NUMBER 2 WITH 8 POINTS

10	0.000000	-1.000000	0.000000	1.000000
11	-1.000000	0.000000	0.000000	1.000000
12	0.000000	0.000000	-1.000000	1.000000
13	0.000000	0.000000	1.000000	1.000000
14	1.000000	0.000000	0.000000	1.000000
15	0.000000	1.000000	0.000000	1.000000

SHELL NUMBER 3 WITH 6 POINTS

16	-1.000000	-1.000000	0.000000	1.414214
17	0.000000	-1.000000	-1.000000	1.414214
18	-1.000000	0.000000	-1.000000	1.414214
19	0.000000	-1.000000	1.000000	1.414214
20	-1.000000	0.000000	1.000000	1.414214
21	1.000000	-1.000000	0.000000	1.414214
22	-1.000000	1.000000	0.000000	1.414214
23	1.000000	0.000000	-1.000000	1.414214
24	0.000000	1.000000	-1.000000	1.414214
25	1.000000	0.000000	1.000000	1.414214
26	0.000000	1.000000	1.000000	1.414214
27	1.000000	1.000000	0.000000	1.414214

SHELL NUMBER 4 WITH 12 POINTS

28	-0.500000	-1.500000	-0.500000	1.658312
29	-1.500000	-0.500000	-0.500000	1.658312
30	-0.500000	-1.500000	0.500000	1.658312
31	-1.500000	-0.500000	0.500000	1.658312
32	-0.500000	-0.500000	-1.500000	1.658312
33	0.500000	-1.500000	-0.500000	1.658312
34	0.500000	-1.500000	0.500000	1.658312
35	-1.500000	0.500000	-0.500000	1.658312
36	-1.500000	0.500000	0.500000	1.658312
37	-0.500000	-0.500000	1.500000	1.658312

38	0.500000	-0.500000	-1.500000	1.658312
39	-0.500000	0.500000	-1.500000	1.658312
40	0.500000	-0.500000	1.500000	1.658312
41	-0.500000	0.500000	1.500000	1.658312
42	0.500000	0.500000	-1.500000	1.658312
43	1.500000	-0.500000	-0.500000	1.658312
44	1.500000	-0.500000	0.500000	1.658312
45	-0.500000	1.500000	-0.500000	1.658312
46	-0.500000	1.500000	0.500000	1.658312
47	0.500000	0.500000	1.500000	1.658312
48	1.500000	0.500000	-0.500000	1.658312
49	0.500000	1.500000	-0.500000	1.658312
50	1.500000	0.500000	0.500000	1.658312
51	0.500000	1.500000	0.500000	1.658312

SHELL NUMBER 5 WITH 24 POINTS

52	-1.000000	-1.000000	-1.000000	1.732051
53	-1.000000	-1.000000	1.000000	1.732051
54	1.000000	-1.000000	-1.000000	1.732051
55	-1.000000	1.000000	-1.000000	1.732051
56	1.000000	-1.000000	1.000000	1.732051
57	-1.000000	1.000000	1.000000	1.732051
58	1.000000	1.000000	-1.000000	1.732051
59	1.000000	1.000000	1.000000	1.732051

SHELL NUMBER 6 WITH 8 POINTS

60	0.000000	-2.000000	0.000000	2.000000
61	-2.000000	0.000000	0.000000	2.000000
62	0.000000	0.000000	-2.000000	2.000000
63	0.000000	0.000000	2.000000	2.000000
64	2.000000	0.000000	0.000000	2.000000
65	0.000000	2.000000	0.000000	2.000000

SHELL NUMBER 7 WITH 6 POINTS

66	-1.500000	-1.500000	-0.500000	2.179449
67	-1.500000	-1.500000	0.500000	2.179449
68	-0.500000	-1.500000	-1.500000	2.179449
69	-1.500000	-0.500000	-1.500000	2.179449
70	-0.500000	-1.500000	1.500000	2.179449
71	-1.500000	-0.500000	1.500000	2.179449
72	0.500000	-1.500000	-1.500000	2.179449
73	-1.500000	0.500000	-1.500000	2.179449
74	0.500000	-1.500000	1.500000	2.179449
75	-1.500000	0.500000	1.500000	2.179449
76	1.500000	-1.500000	-0.500000	2.179449
77	1.500000	-1.500000	0.500000	2.179449
78	-1.500000	1.500000	-0.500000	2.179449
79	-1.500000	1.500000	0.500000	2.179449
80	1.500000	-0.500000	-1.500000	2.179449
81	-0.500000	1.500000	-1.500000	2.179449
82	1.500000	-0.500000	1.500000	2.179449
83	-0.500000	1.500000	1.500000	2.179449
84	1.500000	0.500000	-1.500000	2.179449
85	0.500000	1.500000	-1.500000	2.179449
86	1.500000	0.500000	1.500000	2.179449
87	0.500000	1.500000	1.500000	2.179449
88	1.500000	1.500000	-0.500000	2.179449

SHELL NUMBER 8 WITH 24 POINTS

90	-1.000000	-2.000000	0.000000	2.236068
91	-2.000000	-1.000000	0.000000	2.236068
92	0.000000	-2.000000	-1.000000	2.236068
93	-2.000000	0.000000	-1.000000	2.236068
94	0.000000	-2.000000	1.000000	2.236068
95	-2.000000	0.000000	1.000000	2.236068
96	0.000000	-1.000000	-2.000000	2.236068
97	-1.000000	0.000000	-2.000000	2.236068
98	1.000000	-2.000000	0.000000	2.236068
99	-2.000000	1.000000	0.000000	2.236068
100	0.000000	-1.000000	2.000000	2.236068
101	-1.000000	0.000000	2.000000	2.236068
102	1.000000	0.000000	-2.000000	2.236068
103	0.000000	1.000000	-2.000000	2.236068
104	2.000000	-1.000000	0.000000	2.236068
105	-1.000000	2.000000	0.000000	2.236068
106	1.000000	0.000000	2.000000	2.236068
107	0.000000	1.000000	2.000000	2.236068
108	2.000000	0.000000	-1.000000	2.236068
109	0.000000	2.000000	-1.000000	2.236068
110	2.000000	0.000000	1.000000	2.236068
111	0.000000	2.000000	1.000000	2.236068
112	2.000000	1.000000	0.000000	2.236068
113	1.000000	2.000000	0.000000	2.236068

SHELL NUMBER 9 WITH 24 POINTS

114	-1.000000	-2.000000	-1.000000	2.449490
115	-2.000000	-1.000000	-1.000000	2.449490
116	-1.000000	-2.000000	1.000000	2.449490
117	-2.000000	-1.000000	1.000000	2.449490
118	-1.000000	-1.000000	-2.000000	2.449490
119	-1.000000	-1.000000	2.000000	2.449490
120	1.000000	-2.000000	-1.000000	2.449490
121	1.000000	-2.000000	1.000000	2.449490
122	-2.000000	1.000000	-1.000000	2.449490
123	-2.000000	1.000000	1.000000	2.449490
124	1.000000	-1.000000	-2.000000	2.449490
125	-1.000000	1.000000	-2.000000	2.449490
126	1.000000	-1.000000	2.000000	2.449490
127	-1.000000	1.000000	2.000000	2.449490
128	2.000000	-1.000000	-1.000000	2.449490
129	2.000000	-1.000000	1.000000	2.449490
130	-1.000000	2.000000	-1.000000	2.449490
131	-1.000000	2.000000	1.000000	2.449490
132	1.000000	1.000000	-2.000000	2.449490
133	1.000000	1.000000	2.000000	2.449490
134	2.000000	1.000000	-1.000000	2.449490
135	1.000000	2.000000	-1.000000	2.449490
136	2.000000	1.000000	1.000000	2.449490
137	1.000000	2.000000	1.000000	2.449490

SHELL NUMBER 10 WITH 24 POINTS

RESULT FROM VECGEN FOR RECIPROCAL SPACE VECTORS

NO	KX	KY	KZ	D
1	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

SHELL NUMBER 1 WITH 1 POINTS

2	-6.283185	-6.283185	0.000000	8.885766
3	0.000000	-6.283185	6.283185	8.885766
4	-6.283185	0.000000	6.283185	8.885766
5	0.000000	-6.283185	-6.283185	8.885766
6	6.283185	-6.283185	0.000000	8.885766
7	-6.283185	0.000000	-6.283185	8.885766
8	6.283185	0.000000	6.283185	8.885766
9	-6.283185	6.283185	0.000000	8.885766
10	0.000000	6.283185	6.283185	8.885766
11	6.283185	0.000000	-6.283185	8.885766
12	0.000000	6.283185	-6.283185	8.885766
13	6.283185	6.283185	0.000000	8.885766

SHELL NUMBER 2 WITH 12 POINTS

14	0.000000	-12.566371	0.000000	12.566371
15	-12.566371	0.000000	0.000000	12.566371
16	0.000000	0.000000	12.566371	12.566371
17	0.000000	0.000000	-12.566371	12.566371
18	12.566371	0.000000	0.000000	12.566371
19	0.000000	12.566371	0.000000	12.566371

SHELL NUMBER 3 WITH 6 POINTS

20	-6.283185	-6.283185	12.566371	15.390598
21	6.283185	-6.283185	12.566371	15.390598
22	-6.283185	6.283185	12.566371	15.390598
23	-6.283185	-6.283185	-12.566371	15.390598
24	6.283185	6.283185	12.566371	15.390598
25	6.283185	-6.283185	-12.566371	15.390598
26	-6.283185	6.283185	-12.566371	15.390598
27	6.283185	6.283185	-12.566371	15.390598
28	-6.283185	-12.566371	6.283185	15.390598
29	-12.566371	-6.283185	6.283185	15.390598
30	-6.283185	-12.566371	-6.283185	15.390598
31	6.283185	-12.566371	6.283185	15.390598
32	-12.566371	-6.283185	-6.283185	15.390598
33	-12.566371	6.283185	6.283185	15.390598
34	6.283185	-12.566371	-6.283185	15.390598
35	12.566371	-6.283185	6.283185	15.390598
36	-12.566371	6.283185	-6.283185	15.390598
37	-6.283185	12.566371	6.283185	15.390598
38	12.566371	-6.283185	-6.283185	15.390598
39	12.566371	6.283185	6.283185	15.390598
40	-6.283185	12.566371	-6.283185	15.390598
41	6.283185	12.566371	6.283185	15.390598
42	12.566371	6.283185	-6.283185	15.390598

43	6.283185	12.566371	-6.283185	15.390598

SHELL NUMBER 4 WITH 24 POINTS

44	-12.566371	-12.566371	0.000000	17.771532
45	0.000000	-12.566371	12.566371	17.771532
46	-12.566371	0.000000	12.566371	17.771532
47	0.000000	-12.566371	-12.566371	17.771532
48	12.566371	-12.566371	0.000000	17.771532
49	-12.566371	0.000000	-12.566371	17.771532
50	12.566371	0.000000	12.566371	17.771532
51	-12.566371	12.566371	0.000000	17.771532
52	0.000000	12.566371	12.566371	17.771532
53	12.566371	0.000000	-12.566371	17.771532
54	0.000000	12.566371	-12.566371	17.771532
55	12.566371	12.566371	0.000000	17.771532

SHELL NUMBER 5 WITH 12 POINTS

56	-6.283185	-18.849556	0.000000	19.869177
57	0.000000	-18.849556	6.283185	19.869177
58	-18.849556	-6.283185	0.000000	19.869177
59	0.000000	-6.283185	18.849556	19.869177
60	-18.849556	0.000000	6.283185	19.869177
61	-6.283185	0.000000	18.849556	19.869177
62	0.000000	-18.849556	-6.283185	19.869177
63	6.283185	-18.849556	0.000000	19.869177
64	-18.849556	0.000000	-6.283185	19.869177
65	6.283185	0.000000	18.849556	19.869177
66	-18.849556	6.283185	0.000000	19.869177
67	0.000000	6.283185	18.849556	19.869177
68	0.000000	-6.283185	-18.849556	19.869177
69	18.849556	-6.283185	0.000000	19.869177
70	-6.283185	0.000000	-18.849556	19.869177
71	18.849556	0.000000	6.283185	19.869177
72	-6.283185	18.849556	0.000000	19.869177
73	0.000000	18.849556	6.283185	19.869177
74	6.283185	0.000000	-18.849556	19.869177
75	18.849556	0.000000	-6.283185	19.869177
76	0.000000	6.283185	-18.849556	19.869177
77	18.849556	6.283185	0.000000	19.869177
78	0.000000	18.849556	-6.283185	19.869177
79	6.283185	18.849556	0.000000	19.869177

SHELL NUMBER 6 WITH 24 POINTS

80	-12.566371	-12.566371	12.566371	21.765592
81	-12.566371	-12.566371	-12.566371	21.765592
82	12.566371	-12.566371	12.566371	21.765592
83	-12.566371	12.566371	12.566371	21.765592
84	12.566371	-12.566371	-12.566371	21.765592
85	-12.566371	12.566371	-12.566371	21.765592
86	12.566371	12.566371	12.566371	21.765592
87	12.566371	12.566371	-12.566371	21.765592

SHELL NUMBER 7 WITH 8 POINTS

NUMVR 137 NUMVG 87

AMADL =1.79185851

3.58371702

VOL 0.5000000 SWS 0.4923725

MODE,NPX,NPY,NPZ,NPT 0 0 17 0 285

POINT NUMBER 1 PKX,PKY,PKZ 0.0000 0.0000 0.0100 W
1.0000

QQ DIAGONAL BLOCK

```
-[illegible].50727E+04
 5.90390E-17  5.99974E+00
-6.71812E+02 -2.23871E-18 -1.19995E+01
 2.94279E-17  1.56528E-19  2.23871E-18  5.99974E+00
-4.76298E-20  8.09407E-17 -2.22137E-22  3.28932E-16  8.98887E-01
-4.99177E-19  6.52800E-02 -2.28935E-16  3.14150E-22 -4.01859E-19 -3.59555E+00
-4.47194E+00  2.07595E-16 -1.13068E-01  1.98263E-16  0.00000E+00  9.84350E-19
5.39332E+00
 9.63389E-19 -3.14150E-22 -2.39710E-16  6.52800E-02 -9.86143E-19  0.00000E+00
9.84350E-19 -3.59555E+00
-4.76298E-20  3.29092E-16  2.22137E-22  8.47504E-17  4.49373E+00  9.86143E-19
0.00000E+00  4.01859E-19  8.98887E-01
-5.80181E-17  0.00000E+00  1.17871E-18 -2.60482E+00 -2.97697E-17 -2.34397E-19
4.05154E-16 -1.75834E-01 -1.67848E-16
-5.34792E-01
-6.78641E-23  2.92894E-20  0.00000E+00 -2.04158E-18 -9.74045E-03  1.45841E-16
7.03190E-19 -8.10309E-16  2.15352E-01
-1.39959E-19  3.20875E+00
-[illegible]52930E-17 -2.01800E+00 -6.54931E-20  0.00000E+00 -2.31612E-16  3.08020E-02
2.82420E-16 -9.07815E-19  6.40605E-16
 3.07239E-20  5.42060E-19 -8.02189E+00
-2.57468E-02  5.20869E-19  3.29538E+00  5.34749E-20 -7.86162E-19  5.34885E-16
4.35606E-02  2.66268E-16  5.24127E-19
 6.69639E-19 -8.69003E-20 -9.89662E-19  1.06958E+01
-5.78956E-17  0.00000E+00 -6.37932E-19 -2.01800E+00  6.16426E-16  1.36167E-18
5.67331E-16  3.08020E-02 -1.15297E-16
 1.45013E+01 -1.42052E-18  1.18993E-19  9.89662E-19 -8.02189E+00
 6.78641E-23  7.00092E-19  0.00000E+00  2.85292E-19  2.15352E-01 -7.79724E-16
1.05475E-18  2.92968E-16 -9.74045E-03
-1.34440E-19 -2.24653E+01  1.42052E-18 -8.69003E-20 -5.42060E-19  3.20875E+00
-5.80464E-17 -2.60482E+00 -4.04199E-19  0.00000E+00 -3.29420E-16 -1.75834E-01
3.89862E-16  3.51582E-19 -5.98019E-17
-3.38383E-19  1.34440E-19  1.45013E+01 -6.69639E-19  3.07239E-20  1.39959E-19 -[illegible]
.34792E-01


 0.00000E+00
-5.21613E-19  0.00000E+00
 0.00000E+00  8.00166E-19  0.00000E+00
```

```
  5.91415E-19  5.73221E-22 -8.00166E-19  0.00000E+00
 -4.78275E-20 -5.07772E-19 -1.13505E-19 -5.88827E-18  0.00000E+00
 -3.44431E-19  0.00000E+00  1.43620E-18  1.60521E-19 -2.62523E-19  0.00000E+00
  0.00000E+00 -2.03137E-18  0.00000E+00 -1.24378E-18  2.89296E-19  6.43048E-19
0.00000E+00
 -3.44336E-19 -1.60530E-19  2.3[illegible]E-18  0.00000E+00 -1.93099E-18 -4.72418E-19
6.43048E-19  0.00000E+00
 -1.74426E-22 -4.60535E-18  1.13512E-19 -8.29303E-19  0.00000E+00  1.93099E-18
2.89296E-19  2.62523E-19  0.00000E+00
  1.03859E-18  6.84588E-20 -7.91466E-19  0.00000E+00 -2.92795E-19  1.16742E-19
5.99861E-18  2.48131E-21  3.75650E-18
 0.00000E+00
 -3.46764E-20 -3.16986E-19 -2.37148E-19  1.37086E-18  0.00000E+00  1.43439E-18
3.50227E-19  1.19972E-17 -3.03897E-21
-1.99949E-19  0.00000E+00
  3.46874E-19  0.00000E+00  7.08802E-19  2.65140E-19  1.12682E-19  0.00000E+00
2.77769E-18  4.52141E-19 -9.48463E-18
 6.14523E-19  7.74401E-19  0.00000E+00
  0.00000E+00  3.40269E-19  0.00000E+00 -5.78734E-19  2.61044E-19 -2.60228E-19
0.[illegible]000E+00  2.61883E-18 -2.61044E-19
-1.84313E-19 -1.73813E-18 -1.41386E-18  0.00000E+00
  5.66522E-19 -2.65144E-19 -4.16743E-19  0.00000E+00  4.45303E-18 -4.52141E-19
2.76013E-19  0.00000E+00 -1.13399E-18
 0.00000E+00  3.90987E-19  2.38004E-18  1.41386E-18  0.00000E+00
  3.46785E-20  1.37087E-18  2.37152E-19  1.86373E-19 -2.94187E-21 -5.63269E-18
3.50227E-19 -1.42533E-19  0.00000E+00
-2.79945E-19  0.00000E+00 -3.90987E-19 -1.73813E-18 -7.74401E-19  0.00000E+00
  8.12307E-19  0.00000E+00 -7.91472E-19 -6.84598E-20 -4.38425E-18  2.40203E-21
2.81635E-18 -1.16742E-19  2.90944E-20
 2.70792E-18  2.79945E-19  0.00000E+00  1.84313E-19  6.14523E-19  1.99949E-19
.00000E+00


        POINT NUMBER    2     PKX,PKY,PKZ    0.1250    0.0000    0.0000    W
   .0000

        QQ DIAGONAL BLOCK

 -1.56910E+02
 -3.77229E+01 -2.97950E+00
 -9.85662E-19  1.70122E-19  5.95899E+00
  3.77229E+01  8.93849E+00 -1.70122E-19 -2.97950E+00
 -2.71990E+00 -2.03619E-01  4.40939E-22  1.01809E+00  8.75622E-01
  7.33933E-20 -4.41046E-19  5.75920E-01 -6.23582E-22 -1.31075E-19 -3.50249E+00
  2.22079E+00  4.98762E-01  7.63913E-19 -4.98762E-01 -3.32860E-02  3.21067E-19
5.25373E+00
 -7.32087E-20 -6.53033E-22 -5.75920E-01 -4.41046E-19  4.89690E-19  5.43558E-02 -
3.21067E-19 -3.50249E+00
 -2.71990E+00 -1.01809E+00  4.61764E-22  2.03619E-01  4.43247E+00 -4.89690E-19 -
3.32860E-02  1.31075E-19  8.75622E-01
 -1.79575E-01  7.87691E-03 -1.04691E-19 -2.56930E+00  1.18705E-01  5.90501E-20
1.10599E+00  1.97261E-18  3.07323E-01
-5.31070E-01
  1.34709E-22  1.97655E-19 -2.72864E-02  1.81330E-19  1.55628E-22 -5.81535E-01 -
[illegible].77150E-19 -2.21197E+00 -2.41595E-18
 1.22778E-19  3.18642E+00
  1.39098E-01 -1.96577E+00 -4.41971E-19  3.05071E-02 -4.59744E-01 -4.92140E-22
```

```
1.12614E+00  2.28700E-19  1.74872E+00
 2.48876E-02 -4.75517E-19 -7.96605E+00
  1.73951E-19  1.69893E-19  3.21008E+00  3.60868E-19 -2.60914E-19  1.06173E+00
6.95991E-22 -1.06173E+00 -1.32040E-19
-2.78251E-19 -7.03929E-02  8.68171E-19  1.06214E+01
 -1.39098E-01  3.05071E-02 -2.08075E-19 -1.96577E+00 -1.74872E+00  4.51917E-19
1.12614E+00 -4.92140E-22  4.59744E-01
 1.41987E+01  5.90259E-19  9.63895E-02 -8.68171E-19 -7.96605E+00
  1.41071E-22 -3.47645E-19 -2.72864E-02  9.30541E-20 -2.41595E-18  2.21197E+00
3.50053E-19  5.81535E-01  1.55628E-22
-8.29156E-19 -2.19965E+01 -5.90259E-19 -7.03929E-02  4.75517E-19  3.18642E+00
  1.79575E-01 -2.56930E+00  2.00713E-19  7.87691E-03 -3.07323E-01  1.97261E-18
1.10599E+00  1.16684E-19 -1.18705E-01
 2.12057E-01  8.29156E-19  1.41987E+01  2.78251E-19  2.48876E-02 -1.22778E-19 -
.31070E-01
```

```
 -6.58640E-21
  1.78610E-19  9.58832E-21
 -1.97037E-20 -1.11011E-19 -1.91766E-20
  1.41633E-18 -1.35002E-18  1.11011E-19  9.58832E-21
 -7.68454E-19 -6.28353E-19 -1.13734E-19 -7.45890E-19 -4.20541E-19
 -2.39567E-20  1.20751E-19  1.77725E-18  1.60844E-19  1.10623E-20  1.68216E-18
 -7.14671E-21 -1.63512E-18 -2.09147E-19 -1.53914E-18  3.13934E-18 -2.70970E-20 -
2.52325E-18
  4.77715E-20  1.60850E-19  1.88807E-18  1.20751E-19 -3.77874E-18 -5.12652E-18
2.70970E-20  1.68216E-18
  4.10798E-19 -2.03308E-18 -1.13738E-19 -6.67534E-19  4.50863E-19  3.77874E-18
3.13934E-18 -1.10623E-20 -4.20541E-19
  1.31563E-19 -7.64350E-19  3.72364E-22 -1.10288E-18  7.31958E-20  1.17200E-19 -
1.06393E-17 -1.23991E-21  1.59915E-16
 2.21859E-20
 -3.47463E-20 -1.25592E-19  2.64779E-18 -6.44954E-22 -8.97126E-20 -3.58585E-19 -
3.51599E-19  2.12787E-17  1.51857E-21
-9.67749E-20 -1.33116E-19
  . 39247E-19  9.44112E-19  2.80833E-19 -2.96031E-18  4.52422E-19  2.83696E-19
6.94396E-19  4.53912E-19 -1.68223E-17
 3.68658E-19  3.74807E-19  3.32789E-19
 -4.76249E-20 -1.43384E-20 -1.54173E-18 -2.29299E-19 -5.72309E-23 -1.04482E-18 -
4.01207E-19 -6.54683E-19 -2.62066E-19
 1.41659E-19 -1.04272E-18 -6.84302E-19 -4.43718E-19
  4.56012E-19 -2.87725E-18  1.75608E-20  9.44112E-19  1.33718E-19  9.91268E-23
1.10820E-18  2.83696E-19  2.83486E-19
 1.60340E-18 -3.00505E-19  1.42781E-18  6.84302E-19  3.32789E-19
 -3.47475E-20  2.68264E-18  2.57349E-18 -7.85344E-21 -1.49521E-21 -1.69142E-19 -
7.67833E-23 -5.72274E-19 -8.97126E-20
 5.16606E-19 -2.48397E-18  3.00505E-19 -1.04272E-18 -3.74807E-19 -1.33116E-19
  3.58601E-19 -2.61345E-19 -1.54882E-18 -7.42903E-19 -3.22014E-16  1.22083E-21
8.45710E-20  2.55944E-23  1.16815E-19
 1.17432E-20 -5.16606E-19  1.60340E-18 -1.41659E-19  3.68658E-19  9.67749E-20  2
.21859E-20
```

```
        POINT NUMBER     3     PKX,PKY,PKZ    0.1250    0.1250    0.0000     W
 12.0000
```

QQ DIAGONAL BLOCK

```
-7.66709E+01
-1.87200E+01 -2.95950E+00
-2.49414E-24 -1.28583E-18  5.91900E+00
 1.87200E+01  1.85228E-18  1.28583E-18 -2.95950E+00
-2.52059E-19 -1.98940E-01 -2.22137E-22 -2.70509E-01  8.52894E-01
 2.56428E-19 -1.52999E-23  5.62687E-01  3.14150E-22  1.54283E-19 -3.41158E+00
 2.20588E+00  4.87302E-01  2.65002E-23 -4.87302E-01 -4.57307E-18 -3.77914E-19
5.11736E+00
 5.53334E-19 -1.25660E-21 -5.62687E-01 -1.52999E-23  4.26893E-18  7.46780E-18
3.77914E-19 -3.41158E+00
-5.63632E-19  2.70509E-01  8.88549E-22  1.98940E-01  4.55815E+00 -4.26893E-18 -
4.57307E-18 -1.54283E-19  8.52894E-01
 4.77134E-02  2.12140E-20  5.73697E-19 -2.64216E+00  1.15812E-01  2.25190E-22
1.08840E+00 -1.98193E-23  2.85954E-01
-5.27345E-01
-6.78641E-23 -1.42054E-19 -7.34876E-20 -9.93673E-19  0.00000E+00 -5.67359E-01 -
6.75571E-22 -2.17680E+00  2.42735E-23
 4.28292E-19  3.16407E+00
 1.35902E-01 -1.91474E+00  3.17642E-19  8.21616E-20 -4.48537E-01  0.00000E+00
1.0  69E+00  8.72158E-22  1.72091E+00
-1.85764E-19 -1.65877E-18 -7.91018E+00
 6.03436E-24 -1.99973E-19  3.12676E+00 -2.59354E-19 -1.01539E-21  1.03585E+00
0.00000E+00 -1.03585E+00 -5.03541E-22
-1.48585E-19  5.25419E-19  3.02848E-18  1.05469E+01
-1.35902E-01  4.19129E-18  2.44916E-19 -1.91474E+00 -1.72091E+00  1.75871E-21 -
1.09869E+00  0.00000E+00  4.48537E-01
 1.38990E+01  3.15196E-19 -7.19459E-19 -3.02848E-18 -7.91018E+00
 2.71456E-22 -3.03064E-18 -3.74881E-18 -1.09530E-19  7.65572E-19  2.17680E+00 -
1.36229E-21  5.67359E-01  0.00000E+00
-1.67291E-18 -2.15322E+01 -3.15196E-19  5.25419E-19  1.65877E-18  3.16407E+00
-4.77134E-02 -2.64216E+00  1.74974E-18  1.08219E-18 -2.85954E-01 -6.25087E-19 -
1.08840E+00  4.54097E-22 -1.15812E-01
 2.65786E-18  1.67291E-18  1.38990E+01  1.48585E-19 -1.85764E-19 -4.28292E-19 -5
.27345E-01
```

```
 2.[illegible]9910E-19
-1.87200E+01 -7.88776E-20
-1.57322E-19 -1.86089E-18  1.57755E-19
-1.87200E+01 -8.94862E+00  1.86089E-18 -7.88776E-20
-2.72298E+00 -1.98940E-01  0.00000E+00  2.70509E-01 -3.54005E-19
-8.98648E-21  0.00000E+00  5.62687E-01  0.00000E+00  1.63283E-19  1.41602E-18
 5.87919E-20 -4.87302E-01  0.00000E+00 -4.87302E-01 -2.50502E-01 -3.99960E-19 -
2.12403E-18
 8.00798E-19 -3.14150E-22  5.62687E-01  0.00000E+00 -3.77922E-18  4.09068E-01
3.99960E-19  1.41602E-18
 2.72298E+00  2.70509E-01  2.22137E-22 -1.98940E-01 -2.34122E-20  3.77922E-18 -
2.50502E-01 -1.63283E-19 -3.54005E-19
-4.77134E-02 -5.92796E-02  9.48171E-22 -1.37660E-18  1.15812E-01 -2.97289E-23 -
1.08840E+00 -1.98193E-23  2.85954E-01
 1.04141E-19
 0.00000E+00  3.87098E-19  2.05351E-01 -1.64228E-21  0.00000E+00 -5.67359E-01
3.91867E-23  2.17680E+00  2.42735E-23
-1.94321E-19 -6.24844E-19
 1.35902E-01  7.94740E-19 -8.65578E-19 -2.29589E-01  4.48537E-01  0.00000E+00
1.09869E+00 -1.15139E-22 -1.72091E+00
```

1.17139E-01 7.52602E-19 1.56211E-18
 0.00000E+00 -2.11639E-19 -1.29780E-18 7.06741E-19 -5.04805E-23 -1.03585E+00
0.00000E+00 -1.03585E+00 6.64758E-23
 1.46357E-18 -3.31318E-01 -1.37406E-18 -2.08281E-18
 1.35902E-01 2.29589E-01 2.59203E-19 7.94740E-19 -1.72091E+00 8.74348E-23
1.09869E+00 0.00000E+00 4.48537E-01
 1.20992E-17 -3.10471E-18 4.53676E-01 1.37406E-18 1.56211E-18
 6.78641E-23 2.68298E-18 -2.05351E-01 -1.15919E-19 -2.42735E-23 2.17680E+00 -
6.77267E-23 -5.67359E-01 0.00000E+00
-1.61929E-21 -1.87440E-17 3.10471E-18 -3.31318E-01 -7.52602E-19 -6.24844E-19
 -4.77134E-02 1.35710E-20 -1.54902E-18 5.92796E-02 2.85954E-01 1.98193E-23 -
1.08840E+00 2.25756E-23 1.15812E-01
 3.88940E-01 1.61929E-21 1.20992E-17 -1.46357E-18 1.17139E-01 1.94321E-19 1
.04141E-19

6. ZAKLJUČAK

Izračunavanje elektronske zonske strukture predstavlja usko specijalizovanu oblast fizike čvrstog stanja, pa ipak omogućava interpretaciju velikog broja eksperimentalnih činjenica. U ovom radu dat je kratak pregled metoda za izračunavanje zonske strukture, kao i razlozi zbog kojih smo se opredelili za proučavanje LMTO metoda. Treba naglasiti da se zbog svoje računske efikasnosti i mogućnosti primene na široki spektar materijala, LMTO metoda ubraja u najčešće korišćene. Posebnu prednost ovom metodu daje njegova osobina da se računanje može podeliti na dva nezavisna dela: prvi koji zavisi od potencijala i drugi koji zavisi od strukture kristala.

Ovaj rad se bavio ispitivanjem strukturnih konstanti - - nosilaca informacija o uticaju konkretne strukture kristala na zonsku strukturu. Opisane su tri vrste strukturnih konstanti i njihove osobine. LMTO metod u aproksimaciji atomskih sfera (ASA) koristi kanonske strukturne konstante koje ne zavise od energije i invarijantne su na uniformnu promenu skale rešetke.

U radu je dat program za izračunavanje kanonskih strukturnih konstanti i njihove matrice su izračunate za kubnu zapreminski centriranu strukturu. Iz opisa datoteke ulaznih podataka vidi se da je veoma lako promeniti ove podatke i izračunati strukturne konstante za bilo koju drugu strukturu.

7. SPISAK LITERATURE

[1] M. Born, J.R. Oppenheimer, Ann. Phys.,97, 457 (1927)

[2] J.C. Slater: Phys. Rev. 51, 846 (1937)

[3] O.K. Andersen: "Comments on the KKR Wavefunctions, Extension of the Spherical Wavw Expansion Beyond the Muffin-Tins", in Computational Methods in Band Theory, ed. by P.M. Markus, J.F. Janak, A.R. Williams (Plenum, New York 1971) p. 178

[4] O. Jepsen: Phys. Rev. B 12, 2988 (1975)

[5] O. Jepsen, O.K. Andersen, A.R. Mackintosh: Phys.Rev. B12, 3084 (1975)

[6] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev., 136, B 864 (1964)

[7] W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev., 140, A 1133 (1965)

[8] S. Raimes: "The Wave Mechanics of Electrons in Metals", Amsterdam (1961)

[9] H. L. Skriver: "The LMTO Method, Muffin-Tin Orbitals and Electronic Structure", Spinger-Verlag (1984)

[10] O.K. Andersen, O. Jepsen: Physica B91, 317 (1977)

[11] Y.D. Talman: "Special Functions", Benjamin, New York, (1968)

[12] Z. Popović: "Metod pseudopotencijala i problem proračuna Fermi površi kod polumetala" (Magistarski rad), Beograd (1987)

[13] O.K. Andersen: Phys. Rev. B12, 3060 (1975)

[14] **К. В. КИРИЛЛОВ, С. Ю. САВРАСОВ: "ПРОГРАММА** ДЛЯ **САМОСОГЛАСОВАННОГО РАСЧЕТА ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДОМ** ЛМТО", **МОСКВА** (1987)

```
CC$RESET FREE
CC$SET DBLTOSNGL
CCFILE  5(KIND=DISK,TITLE='DATA/STR/FCP',FILETYPE=7)
CCFILE  6(KIND=PRINTER)
CCFILE  9(KIND=DISK,MAXRECSIZE=30,BLOCKSIZE=300,FILETYPE=7,
CC         1AREASIZE=15,AREAS=10,TITLE='STR/FCP/F2')
C     *************************************************************
C     *
C     *    CALCULATION OF CANONICAL STRUCTURE CONSTANTS
C     *    VERSION JUN. 1985
C     *
C     *    H.L.SKRIVER
C     *    RISOE NATIONAL LABORATORY
C     *    DK-4000 ROSKILDE
C     *    DENMARK
C     *
C     *************************************************************
C     *
C     *    FILES AND THEIR ATTRIBUTES
C     *
C     *    FILE 5 :FORMATTED,TYPE=SEQUENTIAL,RECORDLENGTH=80,
C     *            NAME=DATA/STR/XXX
C     *    FILE 6 :PRINTER
C     *    FILE 9 :UNFORMATTED,TYPE=SEQUENTIAL,RECORDLENGTH=VARIABLE,
C     *            NAME=STR/XXX/A
C     *
C     *************************************************************
C     *
C     *    INPUT  (FILE 5) <MAIN>
C     *    -----
C     *
C     *    ALAMDA :CONVERGENCE PARAMETER LAMDA
C     *    AMAX   :RADIUS OF CONVERGENCE SPHERE IN REAL SPACE IS
C     *            AMAX/LAMDA
C     *    BMAX   :RADIUS OF CONVERGENCE SPHERE IN RECIPROCAL SPACE IS
C     *            2.*ALAMDA*BMAX
C     *    BOA    :B/A LATTICE PARAMETER
C     *    BSX
C     *    BSY    :PRIMITIVE VECTORS IN REAL SPACE,UNITS OF A
C     *    BSZ
C     *    COA    :C/A LATTICE PARAMETER
C     *    DUMMY  :NOT USED
C     *    ICONVRG :=-1:MADELUNG CONSTANTS ONLY
C     *            =0:NO CONVERGENCE TEST
C     *            =1:CONVERGENCE TEST
C     *    IPRIM  :=0:READ PRIMITIVE VECTORS ON FILE 5
C     *            =1:GENERATE STANDARD PRIMITIVE VECTORS FROM
C     *               A,B,C,ALPHA,BETA, AND GAMMA
C     *    LAT    :BRILLOUIN ZONE, SEE <MESH>
C     *    MODE   :=0:AUTOMATIC GENERATION OF K-POINTS,<MESH>
C     *            =1:K-POINTS FROM INPUT
C     *            =-1:K=0, FOR MULTIPOLE EXPANSION
C     *    NL     :NUMBER OF L-QUANTUM NUMBERS,LMAX=NL-1
C     *    NOWRT  :=0:SHORT PRINTOUT
C     *            :=1:PRINT VECTORS
C     *            =2:PRINT STRUCTURE CONSTANT MATRIX
C     *    NPOINT :=NPX:NUMBER OF K-POINTS TO BE READ,MODE=1
C     *    NPX
C     *    NPY    :NUMBERS FOR K-MESH CONSTRUCTION,SEE <MESH>
C     *    NPZ
C     *    NQ     :NUMBER OF ATOMS IN THE PRIMITIVE CELL
C     *    OKX
C     *    OKY    :K-VECTOR IN UNITS OF PI/A,MODE=1. HEXAGONAL
C     *    OKZ     COORDINATES IF LAT=4
C     *    POINT  :SYMMETRY LABEL,MODE=1
```

```
C     *    QX
C     *    QY       :BASIS VECTORS IN REAL SPACE IN UNITS OF A
C     *    QZ
C     *    TXT      :60 CHARACTERS OF TEXT FOR IDENTIFICATION
C     *
C     ******************************************************************
C     *
C     *    OUTPUT (FILE 9) <MAIN>
C     *    ------
C     *
C     *    DUM1     :NOT USED
C     *    KKX
C     *    KKY      :K-VECTOR IN UNITS OF (DKX,DKY,DKZ)*PI/A
C     *    KKZ
C     *    LMQ      :DIMENSION OF STRUCTURE CONSTANT MATRIX, NQ*NLM
C     *    NLM      :SUM OF 2*L+1, =NL**2
C     *    NP       :COUNTER
C     *    NPT      :NUMBER OF K-POINTS IN IRREDUCIBLE ZONE,MODE=0
C     *              NUMBER OF K-POINTS READ,MODE=1
C     *    PKX
C     *    PKY      :K-VECTOR IN UNITS OF PI/A,RECTANGULAR COORD.
C     *    PKZ
C     *    SRL      :LOWER TRIANGLE OF STRUCTURE CONSTANT MATRIX,
C     *              REAL PART
C     *    SIL      :LOWER TRIANGLE OF STRUCTURE CONSTANT MATRIX,
C     *              IMAGINARY PART
C     *    SWS      :WIGNER-SEITZ RADIUS IN UNITS OF A
C     *    WW       :SYMMETRY WEIGHTS
C     *
C     ******************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 CIM,CCIM,SPHRM,DCMPLX
      COMMON/B1/CIM,CCIM,C(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTFI,FACRCH,
     1ALAMDA,TWOPI,FPL3OM,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICNVRG,NOST,
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NR0,NL2,KLM0,NL,NLM,LMQ,NOPRT,IPIM,IPIGC
      COMMON/B2/SRL(4096),SIL(4096)
      COMMON/MSH/DKX,DKY,DKZ,DHX,BOA,COA,ALF,BET,GAM,IKX(3),IKY(3),
     1IKZ(3),KX(2500),KY(2500),KZ(2500),W(2500)
      COMMON/VEC/BSX(3),BSY(3),BSZ(3),BKX(3),BKY(3),BKZ(3),QX(6),QY(6),
     1QZ(6),ASX(500),ASY(500),ASZ(500),AKX(500),AKY(500),AKZ(500),
     2DR(500),DG(500),
     3USX(500),USY(500),USZ(500),UKX(500),UKY(500),UKZ(500)
      INTEGER TLAT(14)/'  SC',' FCC',' BCC',' HEX','  ST',' BCT',
     1'TRIG','  SO','BACO',' BCO',' FCO','  SM',' BCM','TRIC'/
      INTEGER TXT(15)/'STR ','FOR ',':   ',12*'    '/,POINT/'    '/
      DATA IDUM/0/,DUM1/0.D0/
      OPEN(5,FORM='FORMATTED',RECL=80,NAME='STR.DAT',TYPE='OLD')
      OPEN(6,FORM='FORMATTED',NAME='STR.OUT',TYPE='NEW')
      OPEN(9,FORM='UNFORMATTED',NAME='STR.DSK',TYPE='NEW')
    1 FORMAT(15A4)
CC  2 FORMAT(3E15.7)
    3 FORMAT(2I5,5X,F10.6)
    4 FORMAT(1H ,//,11X,'BASIS VECTORS',//)
    5 FORMAT(1H1,10X,15A4,/)
    6 FORMAT(1H ,10X,'AMAX',F10.5,' BMAX',F10.5,/,11X,'RMAX',F10.5,
     1' GMAX',F10.5,/,10X,' NL',I4,' NQ',I4,' NLM',I4,' LMQ',I4,/,10
     2' LAMDA',F10.5,/,10X,' NOWRT',I4,' ICNVRG',I4,' IPRIM',I3,/)
    7 FORMAT(4I5)
    8 FORMAT(3F10.6,A4)
    9 FORMAT(1H ,//,11X,'POINT NUMBER',I5,5X,'PKX,PKY,PKZ',3F10.4,
     15X,'W',F10.4,5X,A4)
   10 FORMAT(1H ,/,11X,'VOL',F15.7,'  SWS',F15.7)
   11 FORMAT(1H ,11X,'(',F10.5,',',F10.5,',',F10.5,' )')
   12 FORMAT(1H ,//,11X,'PRIMITIVE VECTORS IN UNIT CELL OF ',A4,//,1
     1'BOA',F15.10,'  COA',F15.10,//)
```

```
CC 13 FORMAT(3F10.5,3I5)
   14 FORMAT(1H ,/,11X,'*MATRICES GENERATED AT AN EARLIER RU *',//
   16 FORMAT(1H ,/,11X,'MODE,NPX,NPY,NPZ,NPT',5I5)
   17 FORMAT(1H ,/,11X,'NGST ='I2)
C
      IDIM=64
      CIM=DCMPLX(0.D00,1.D00)
      CCIM=DCMPLX(0.D00,-1.D00)
      PI=4.D00*DATAN(1.D00)
      TWOPI=2.D00*PI
      FOURPI=4.D00*PI
      SQRTPI=DSQRT(PI)
C
      READ(5,1) (TXT(I),I=4,15)
C
      TXT(15)=' NEW'
C
CC    READ(5,13) AMAX,BMAX,DUMMY,NOWRT,ICNVRG,IPRIM
      READ(5,'(4(6X,F4.2))') ALAMDA,AMAX,BMAX,DUMMY
CC    READ(5,3) NL,NQ,ALAMDA
      READ(5,'(3X,I2,4X,I2,7X,I2,8X,I2,7X,I2)')NL,NQ,
     1                                          NOWRT,ICNVRG,IPRIM
      READ(5,8) DUMMY
C
      NLM=NL*NL
      LMQ=NLM*NQ
      NL2=2*NL-1
      L=NL2-1
      KLM0=L*(L+1)+L+1
      RMAX=AMAX/ALAMDA
      GMAX=2.*ALAMDA*BMAX
C
      CALL FACTOR(4*(NL-1))
      CALL GAUNT
C
      WRITE(6,5) TXT
      WRITE(6,6) AMAX,BMAX,RMAX,GMAX,NL,NQ,NLM,LMQ,ALAMDA,
     1NOWRT,ICNVRG,IPRIM
C
C     CONSTRUCT OR READ PRIMITIVE VECTORS BSX,BSY,BSZ OF REAL SPA
C
      CALL PRIMV(LAT,IPRIM)
C
C     READ THE NQ BASIS VECTORS QX,QY,QZ IN THE PRIMITIVE  CELL
C
      DO 21 I=1,NQ
CC 21 READ(5,2) QX(I),QY(I),QZ(I)
   21 READ(5,'(3F10.6)') QX(I),QY(I),QZ(I)
      WRITE(6,12) TLAT(LAT),BOA,COA
      DO 30 I=1,3
   30 WRITE(6,11) BSX(I),BSY(I),BSZ(I)
      WRITE(6,4)
      DO 25 I=1,NQ
   25 WRITE(6,11) QX(I),QY(I),QZ(I)
C
C     GENERATE THE NUMVR AND NUMVG SHORTEST VECTORS
C     OF REAL AND RECIPROCAL SPACE
C
      CALL VECGEN(NUMR,NUMG,LAT)
C
      SWS=(3.D00*VOL/FOURPI/NQ)**(1.D00/3.D00)
      SWSL=SWS*ALAMDA
      FPL3OM=PI*SQRTPI/ALAMDA**3.D00/VOL
C
      CALL MADL
```

```
C
      IF(ICNVRG.LT.0) STOP
      WRITE(6,10) VOL,SWS
      READ(5,7) MODE,NPX,NPY,NPZ
      IF(MODE) 33,31,28
C
C     GENERATE MESH IN K-SPACE
C
   31 CALL MESH(LAT,NPX,NPY,NPZ,NPT)
C
      WRITE(6,16) MODE,NPX,NPY,NPZ,NPT
      WRITE(9) TXT,NL,NQ,NLM,LMQ,SWS
      WRITE(9) NPX,NPY,NPZ,LAT,NPT,BOA,COA,DUM1
      NGST=1
      BACKGR=0.
C
      DO 23 NP=1,NPT
      IF(NP.GT.3) NOWRT=0
      KKX=KX(NP)
      KKY=KY(NP)
      KKZ=KZ(NP)
      CALL KTRNSF(LAT,KKX,KKY,KKZ,PKX,PKY,PKZ)
      IF(NOWRT.GT.1) WRITE(6,9) NP,PKX,PKY,PKZ,W(NP),POINT
      WW=W(NP)
      WRITE(9) NP,PKX,PKY,PKZ,WW,POINT,KKX,KKY,KKZ
      PKXP=PKX*PI
      PKYP=PKY*PI
      PKZP=PKZ*PI
C
      CALL SMTRX(PKXP,PKYP,PKZP)
C
      J1=-IDIM
      DO 24 JJ=1,LMQ
      J1=J1+IDIM
      I1=J1+JJ
      I2=J1+LMQ
      WRITE(9) (SRL(LIN),LIN=I1,I2)
   24 WRITE(9) (SIL(LIN),LIN=I1,I2)
   23 CONTINUE
CC      CLOSE (9,DISP=CRUNCH)
      CLOSE(9)
      STOP
C
C     READ K-VECTOR IN UNITS OF PIA
C
   28 WW=0.D0
      NPOINT=NPX
      WRITE(6,16) MODE,NPX,NPY,NPZ,NPOINT
      WRITE(9) TXT,NL,NQ,NLM,LMQ,SWS
      WRITE(9) NPX,NPY,NPZ,LAT,NPOINT,BOA,COA,DUM1
      KKX=0
      KKY=0
      KKZ=0
      FX=PI
      FY=PI/BOA
      FZ=PI/COA
      FHX=0.D0
C
      DO 29 I=1,NPOINT
      READ(5,8) OKX,OKY,OKZ,POINT
      WRITE(6,9) I,OKX,OKY,OKZ,WW,POINT
      WRITE(9) I,OKX,OKY,OKZ,WW,POINT,KKX,KKY,KKZ
      PKXP=OKX*FX
      PKYP=OKY*FY
      PKZP=OKZ*FZ
```

```
C
      CALL SMTRX(PKXP,PKYP,PKZP)
C
      J1=-IDIM
      DO 26 J=1,LMQ
      J1=J1+IDIM
      I1=J1+J
      I2=J1+LMQ
      WRITE(9) (SRL(LIN),LIN=I1,I2)
   26 WRITE(9) (SIL(LIN),LIN=I1,I2)
   29 CONTINUE
CC       CLOSE (9,DISP=CRUNCH)
      CLOSE(9)
      STOP
C
C     STRUCTURE CONSTANTS FOR K= 0. FOR USE IN MULTIPOLE EXPANSION
C
   33 WW=0.D0
      NPOINT=1
      I=1
      WRITE(6,16) MODE,NPX,NPY,NPZ,NPOINT
      WRITE(9) TXT,NL,NQ,NLM,LMQ,SWS
      WRITE(9) NPX,NPY,NPZ,LAT,NPOINT,BOA,COA,SUM1
      KKX=0
      KKY=0
      KKZ=0
      POINT='    '
      OKX=0.
      OKY=0.
      OKZ=0.
      WRITE(6,9) I,OKX,OKY,OKZ,WW,POINT
      WRITE(9) 1,OKX,OKY,OKZ,WW,POINT,KKX,KKY,KKZ
C
C     EXCLUDE G = 0 IN SUM AND SET BACKGROUND TERM TO BE SUBTRACTED
C
      NGST=2
      BACKGR=PI*SWS/VOL/ALAMDA**2
C
      CALL SMTRX(0.,0.,0.)
C
      J1=-IDIM
      DO 32 J=1,LMQ
      J1=J1+IDIM
      I1=J1+J
      I2=J1+LMQ
      WRITE(9) (SRL(LIN),LIN=I1,I2)
   32 WRITE(9) (SIL(LIN),LIN=I1,I2)
CC       CLOSE (9,DISP=CRUNCH)
      CLOSE(9)
      STOP
      END
      BLOCK DATA
C    ******************************************************************
C    *                                                                *
C    *   INSERT LM-DATA                                               *
C    *                                                                *
C    ******************************************************************
      COMMON/LDATA/LL(81),MM(81)
      DATA LL/0,3*1,5*2,7*3,9*4,11*5,13*6,15*7,17*8/
      DATA MM/0,-1,0,1,-2,-1,0,1,2,-3,-2,-1,0,1,2,3,-4,-3,-2,-1,0,1,2,
     13,4,-5,-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4,5,-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4,5,6,
     2-7,-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4,5,6,7,-8,-7,-6,-5,-4,-3,-2,-1,0,
     31,2,3,4,5,6,7,8/
      END
      SUBROUTINE VECGEN(NUMR,NUMG,LAT)
```

```
C     *************************************************************************
C     *
C     *   GENERATE VECTORS OF DIRECT AND RECIPROCAL SPACE FROM
C     *   BASIC TRANSLATION VECTORS (BSX,BSY,BSZ)
C     *
C     *************************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
CC      REAL*4 ZRN371,ZRN372
      COMPLEX*16 CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,CC(25,25),FAC(17),BAC(17),SQRTPI,BACRCN,
     1ALANDA,TWOPI,FPL30M,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICONVG,NOST,
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NR0,NL2,KLM0,NL,NLP,LMO,ROOFT,IPID,IUNIC
      COMMON/NSH/DKX,DKY,DKZ,DHX,BOA,COA,ALF,BET,GAM,IKX(3),IKY(3),
     1IKZ(3),KX(2500),KY(2500),KZ(2500),W(2500)
      COMMON/VEC/BSX(3),BSY(3),BSZ(3),BKX(3),BKY(3),BKZ(3),QX(6),QY(6),
     1QZ(6),ASX(500),ASY(500),ASZ(500),AKX(500),AKY(500),AKZ(500),
     2DR(500),DG(500),
     3USX(500),USY(500),USZ(500),UKX(500),UKY(500),UKZ(500)
      DIMENSION CSX(500),CSY(500),CSZ(500),C(500),DA(3),DF(3)
      INTEGER NSR(100),NSG(100)
    1 FORMAT(1H ,//,15X,'SHELL NUMBER',I5,' WITH',I5,' POINTS',//)
    2 FORMAT(1H ,10X,I5,4F10.6)
    3 FORMAT(1H ,10X,'(',F10.5,',',F10.5,',',F10.5,')',/)
    4 FORMAT(1H1,14X,'RESULT FROM VECGEN FOR REAL SPACE VECTORS',//,
     114X,'NO',5X,'SX',8X,'SY',8X,'SZ',8X,'D',/)
    5 FORMAT(1H1,10X,'RESULT FROM VECGEN FOR RECIPROCAL SPACE VECTORS
     1//,14X,'NO',5X,'KX',8X,'KY',8X,'KZ',8X,'D',/)
    6 FORMAT(1H ,//,11X,'PRIMITIVE VECTORS OF RECIPROCAL SPACE',/,11X
     1'IN UNITS OF 2*PI/A'/)
    7 FORMAT(1H ,//,11X,'R1',F10.4,' RA',F10.4,/,11X,'G1',F10.4,
     1' GA',F10.4,/)
    8 FORMAT(1H ,10X,'NUMVR',I4,' NUMVG',I4,/)
    9 FORMAT(1H ,'*** NR EXCEEDS DIMENSIONS OF ASX,ASY,ASZ',I5,5F10.
   10 FORMAT(1H ,'*** NG EXCEEDS DIMENSIONS OF AKX,AKY,AKZ',I5,5F10.
   11 FORMAT(1H ,10X,'NUMR',I4,' NUMG',I4,/)
C
      WRITE(6,6)
C
C     PRIMITIVE VECTORS (BKX,BKY,BKZ) OF RECIPROCAL SPACE
C
      DO 20 I=1,3
      I1=1+MOD(I,3)
      I2=1+MOD(I1,3)
      CALL CROSS(BSX(I1),BSY(I1),BSZ(I1),BSX(I2),BSY(I2),BSZ(I2),
     1BKX(I),BKY(I),BKZ(I))
   20 CONTINUE
      VOL=DABS(BSX(1)*BKX(1)+BSY(1)*BKY(1)+BSZ(1)*BKZ(1))
C
      DO 21 I=1,3
      BKX(I)=BKX(I)/VOL
      BKY(I)=BKY(I)/VOL
      BKZ(I)=BKZ(I)/VOL
   21 WRITE(6,3) BKX(I),BKY(I),BKZ(I)
      DO 32 I=1,3
      BKX(I)=BKX(I)*TWOPI
      BKY(I)=BKY(I)*TWOPI
   32 BKZ(I)=BKZ(I)*TWOPI
C
C     CALCULATE RADII RA,GA OF SPHERES HOLDING ALL VECTORS USED IN LA
C     TICE SUMS. R1 IS LONGEST BASIS VECTOR. G1 IS LONGEST VECTOR IN
C     BRILLOUIN ZONE. MUST BE RECONSIDERED IN ANY NEW APPLICATIONS
C
      R1=1.E-06
      DO 35 IQ=1,NQ
      PQX=QX(IQ)
```

```
      PQY=QY(IQ)
      PQZ=QZ(IQ)
      DO 35 JQ=IQ,NQ
      X=PQX-QX(JQ)
      Y=PQY-QY(JQ)
      Z=PQZ-QZ(JQ)
      DQ=DSQRT(X*X+Y*Y+Z*Z)
      IF(DQ.LT.R1) GO TO 35
      R1=DQ
   35 CONTINUE
      R1=R1*1.001
      RA=RMAX+R1
      IF(LAT.EQ.1) G1=DSQRT(3.D00)*3.15
      IF(LAT.EQ.2) G1=DSQRT(5.D00)*3.15
      IF(LAT.EQ.3) G1=6.29D00
      IF(LAT.EQ.4) G1=DSQRT(16./9.+(1./COA)**2)*3.15
      IF(LAT.EQ.5) G1=DSQRT(2.+(1./COA)**2)*3.15
      IF(LAT.EQ.6) G1=DSQRT(0.5+(1./COA)**2)*3.29
      IF(LAT.EQ.7) G1=DSQRT(16./27.+(1./COA)**2)*6.52
      IF(LAT.EQ.9) G1=DSQRT(1.+(2./BOA)**2+(1./COA)**2)*3.15
CC      IF(LAT.EQ.13) G1=DSQRT(AMAX1(0.25/BOA**2*(1.+COTAN(GAM)**2)
CC     1+1./COA**2,1./COS(GAM)**2+DABS(0.5/BOA*COTAN(GAM))**2
CC     2+0.25/BOA**2.))*6.29
      IF(GAM.EQ.0.D00) GO TO 9736
      COTAN=1./(DTAN(GAM)**2)
      IF(LAT.EQ.13) G1=DSQRT(DMAX1(0.25/BOA**2*(1.+COTAN)
     1+1./COA**2,1./DCOS(GAM)**2+DABS(0.5/BOA*COTAN)**2
     2+0.25/BOA**2.))*6.29
 9736 GA=GMAX+G1
      WRITE(6,7) R1,RA,G1,GA
C
      DO 36 I=1,3
      DD(I)=DSQRT(BSX(I)**2+BSY(I)**2+BSZ(I)**2)
   36 DK(I)=DSQRT(BKX(I)**2+BKY(I)**2+BKZ(I)**2)
      DDM=DMAX1(DD(1),DD(2),DD(3))
      DKM=DMAX1(DK(1),DK(2),DK(3))
      DDM=TWOPI/DDM
      DKM=TWOPI/DKM
      NUMR=2*(INT(RA/DKM)+1)+1
      NUMG=2*(INT(GA/DDM)+1)+1
CC      ZRN371=SNGL(RA/DKM)
CC      ZRN372=SNGL(GA/DDM)
CC      NUMR=2*(IIFIX(ZRN371)+1)+1
CC      NUMG=2*(IIFIX(ZRN372)+1)+1
      NUMRH=NUMR/2+1
      NUMGH=NUMG/2+1
      WRITE(6,11) NUMR,NUMG
C
C     REAL SPACE
C
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,4)
      NR=0
      NR0=0
      DO 22 L=1,NUMR
      A=L-NUMRH
      DO 22 M=1,NUMR
      B=M-NUMRH
      DO 22 N=1,NUMR
      C=N-NUMRH
      SX=A*BSX(1)+B*BSX(2)+C*BSX(3)
      SY=A*BSY(1)+B*BSY(2)+C*BSY(3)
      SZ=A*BSZ(1)+B*BSZ(2)+C*BSZ(3)
      DX=DSQRT(SX*SX+SY*SY+SZ*SZ)
      IF(DX.GT.RA) GO TO 22
      IF(DX.LE.RMAX) NR0=NR0+1
```

```
      NR=NR+1
      IF(NR.GT.500) GO TO 33
      D(NR)=DX
      CSX(NR)=SX
      CSY(NR)=SY
      CSZ(NR)=SZ
   22 CONTINUE
C
C     SORT VECTORS IN ORDER OF INCREASING D
C
      DA=1.D-06
      NSH=0
      NSHL=-1
      DO 23 K=1,NR
      AMIN=1000.
      DO 24 N=1,NR
      IF(D(N)-AMIN)25,24,24
   25 AMIN=D(N)
      N1=N
   24 CONTINUE
      NSHL=NSHL+1
      ASX(K)=CSX(N1)
      ASY(K)=CSY(N1)
      ASZ(K)=CSZ(N1)
      DB=D(N1)
      DR(K)=DB
      IF(DB.GT.DA+1.D-06) GO TO 26
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,2)K, ASX(K),ASY(K),ASZ(K),DB
      GO TO 23
   26 NSH=NSH+1
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,1) NSH,NSHL
      NSR(NSH)=NSHL
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,2)K, ASX(K),ASY(K),ASZ(K),DB
      NSHL=0
      DA=DB
   23 D(N1)=1000.
      NSH=NSH+1
      NSHL=NSHL+1
      NSR(NSH)=NSHL
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,1) NSH,NSHL
      NUMVR=NR
      NSHLR=NSH
C
C     RECIPROCAL SPACE
C
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,5)
      NG=0
      DO 27 L=1,NUMG
      A=L-NUMGH
      DO 27 M=1,NUMG
      B=M-NUMGH
      DO 27 N=1,NUMG
      C=N-NUMGH
      GX=A*BKX(1)+B*BKX(2)+C*BKX(3)
      GY=A*BKY(1)+B*BKY(2)+C*BKY(3)
      GZ=A*BKZ(1)+B*BKZ(2)+C*BKZ(3)
      DX=DSQRT(GX*GX+GY*GY+GZ*GZ)
      IF(DX.GT.GA) GO TO 27
      NG=NG+1
      IF(NG.GT.500) GO TO 34
      D(NG)=DX
      CSX(NG)=GX
      CSY(NG)=GY
      CSZ(NG)=GZ
   27 CONTINUE
```

```
C
C     SORT VECTORS IN ORDER OF INCREASING D
C
      DA=1.E-06
      NSH=0
      NSHL=-1
      DO 28 K=1,NG
      AMIN=1000.
      DO 29 N=1,NC
      IF(D(N)-AMIN)30,29,29
   30 AMIN=D(N)
      N1=N
   29 CONTINUE
      NSHL=NSHL+1
      AKX(K)=CSX(N1)
      AKY(K)=CSY(N1)
      AKZ(K)=CSZ(N1)
      DB=D(N1)
      DG(K)=DB
      IF(DB.GT.DA+1.D-07) GO TO 31
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,2) K,AKX(K),AKY(K),AKZ(K),DB
      GO TO 28
   31 NSH=NSH+1
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,1) NSH,NSHL
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,2)K, AKX(K),AKY(K),AKZ(K),DB
      NSG(NSH)=NSHL
      NSHL=0
      DA=DB
   28 D(N1)=1000.
      NSH=NSH+1
      NSHL=NSHL+1
      NSG(NSH)=NSHL
      IF(NOWRT.GT.0) WRITE(6,1) NSH,NSHL
      NUMVG=NG
      NSHLG=NSH
      WRITE(6,8) NUMVR,NUMVG
      RETURN
   33 WRITE(6,9) NR,DX,RA,RMAX
      STOP
   34 WRITE(6,10)NG,DX,GA,GMAX
      STOP
      END
      SUBROUTINE SMTRX(PKXP,PKYP,PKZP)
C    **************************************************************************
C    *
C    *   CALCULATION OF THE STRUCTURE CONSTANT MATRIX
C    *
C    **************************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 SUMR,SUMG,SR,CIM,CCIM,CIL,DCMPLX,YLM,CDEXP,CXPRDG,
     1SRC
      REAL*8 DREAL,DIMAG
      COMMON/B1/CIM,CCIM,C(625),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,GACKOP,
     1ALAMDA,TWOPI,FPL3OM,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICONVC,NOST,
     2NUMVR,NUMVG,NG,NRO,NL2,KLMO,NL,NLM,LMO,NOWRT,IDIM,IDIMC
      COMMON/B2/SRKLP(4096),SIKLP(4096)
      COMMON/LDATA/LL(81),MM(81)
      COMMON/VEC/BSX(3),BSY(3),BSZ(3),BKX(3),BKY(3),BKZ(3),QX(6),QY(6
     1QZ(6),ASX(500),ASY(500),ASZ(500),AKX(500),AKY(500),AKZ(500),
     2DR(500),DG(500),
     3USX(500),USY(500),USZ(500),UKX(500),UKY(500),UKZ(500)
      COMMON/YLMD/YLM(81)
      DIMENSION GLHS(500,9),GLH(9),FBLN(500,9),BDOTS(500),LRG(500),
     1SR(81),CXPRDK(500),SUMR(81),SUMG(81)
  100 FORMAT(1H ,9(1PE13.5))
```

```
  101 FORMAT(1H ,///)
  102 FORMAT(1H0,10X,'QQ DIAGONAL BLOCK',/)
  103 FORMAT(1H ,10(1PE11.3))
  104 FORMAT(1H0,10X,'QP Q OFF DIAGONAL BLOCK , QP,Q =',2I5,/)
  105 FORMAT(1H0,25X,'CONVERGENCE TEST')
  106 FORMAT(1H0,'RECIPROCAL SPACE SUMS',/)
  107 FORMAT(1H0,'REAL SPACE SUMS',/)
C
C     QQ DIAGONAL BLOCKS
C
      PKX=PKXP
      PKY=PKYP
      PKZ=PKZP
      CXPRDK(1)=DCMPLX(1.D00,0.D00)
      DO 22 I=2,NR0
      DRI=DR(I)
      USX(I)=ASX(I)/DRI
      USY(I)=ASY(I)/DRI
      USZ(I)=ASZ(I)/DRI
      PDR=PKX*ASX(I)+PKY*ASY(I)+PKZ*ASZ(I)
      CXPRDK(I)=CDEXP(PDR*CIM)
      ALFA=ALAMDA*DRI
C
C     CONVERGENCE FUNCTION, REAL SPACE
C
      CALL GAMFC(ALFA,GLH)
      DO 25 LP=1,NL2
   25 GLHS(I,LP)=GLH(LP)
   22 CONTINUE
C
      TWOLAM=2.*ALAMDA
      DO 35 I=NGST,NUMVG
      X=AKX(I)+PKX
      Y=AKY(I)+PKY
      Z=AKZ(I)+PKZ
      D=DSQRT(X*X+Y*Y+Z*Z)
      IF(D.GT.GMAX) GO TO 35
      BETA=D/TWOLAM
      BETASQ=BETA*BETA
      UKX(I)=X/D
      UKY(I)=Y/D
      UKZ(I)=Z/D
C
C     CONVERGENCE FUNCTION, RECIP. SPACE
C
      DO 33 LP=1,NL2
      L=LP-1
   33 FBLN(I,LP)=BETA**(L-2)/EXP(BETASQ)
   35 DG(I)=D
C
C     EVALUATION OF LATTICE SUMS FOR QPP .EQ. 0
C
      DO 44 KLM=1,KLM0
      SUMR(KLM)=DCMPLX(0.D00,0.D00)
   44 SUMG(KLM)=DCMPLX(0.D00,0.D00)
C
C     REAL SPACE
C
      DO 26 I=2,NR0
      CALL YLMPK(USX(I),USY(I),USZ(I),NL2)
      KLM=0
      DO 26 LP=1,NL2
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      DO 26 M=1,NM
```

```
      KLM=KLM+1
   26 SUMR(KLM)=SUMR(KLM)+GLHS(I,LP)*YLM(KLM)*CXPNDR(I)
C
C     RECIP. SPACE
C
      DO 34 I=NGST,NUMVG
      IF(DG(I).GT.GMAX) GO TO 34
      CALL YLMRK(UKX(I),UKY(I),UKZ(I),NL2)
      KLM=0
      DO 28 LP=1,NL2
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      DO 28 M=1,NM
      KLM=KLM+1
   28 SUMG(KLM)=SUMG(KLM)+FBLM(I,LP)*YLM(KLM)
   34 CONTINUE
C
C     SET UP STRUCTURE CONSTANT MATRIX FROM LATTICE SUMS
C
      CIL=CIM
      KLM=0
      DO 51 LP=1,NL2
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      CIL=CIL*CCIM
      AR=SWSL**LP*2.**L/DAC(LP)/SQRTPI
      AG=FPL3OM*AR
      DO 45 M=1,NM
      KLM=KLM+1
   45 SR(KLM)=AR*SUMR(KLM)*CIL+AG*SUMG(KLM)
   51 CONTINUE
      SR(1)=SR(1)-2.0*SWSL/SQRTPI-BACKGR
C
C     INSERT INTO LOWER TRIANGLE
C
      J1=-IDIM
      J2=-IDIMC
      DO 27 JLM=1,NLM
      J2=J2+IDIMC
      J1=J1+IDIM
      L=LL(JLM)
      M=MM(JLM)
      DO 27 ILM=JLM,NLM
      LIN=J1+ILM
      LINC=J2+ILM
      LPP=L+LL(ILM)
      MPP=MM(ILM)-M
      KLM=LPP*LPP+LPP+MPP+1
      SRC=SR(KLM)*C(LINC)
      SRKLP(LIN)=DREAL(SRC)
      SIKLP(LIN)=DIMAG(SRC)
   27 CONTINUE
C
      IF(ICNVRG.EQ.0) GO TO 58
C
C     PRINT INDIVIDUAL CONTRIBUTIONS TO THE LATTICE SUMS. USED
C     FOR TEST OF THE CHOICE OF SPLITTING PARAMETER <LAMDA>
C
      WRITE(6,105)
      KLM=0
      DO 59 LP=1,NL2
      NM=LP*2-1
      AR=SWSL**LP*2.**(LP-1)/DAC(LP)/SQRTPI
      AG=FPL3OM*AR/DAC(LP)
      DO 59 M=1,NM
```

```
      KLM=KLM+1
      SUMR(KLM)=SUMR(KLM)*AR
   59 SUMG(KLM)=SUMG(KLM)*AG
      WRITE(6,107)
      WRITE(6,103) (SUMR(K),K=1,KLM)
      WRITE(6,106)
      WRITE(6,103) (SUMG(K),K=1,KLM)
   58 IF(NOWRT.NE.2) GO TO 30
C
C     PRINT STRUCTURE CONSTANT MATRIX
C
      WRITE(6,102)
      I1=-IDIM
      DO 42 ILM=1,NLM
      I1=I1+IDIM
      I2=I1+ILM
   42 WRITE(6,100) (SRKLP(LIN),LIN=ILM,I2,IDIM)
      WRITE(6,101)
      I1=-IDIM
      DO 43 ILM=1,NLM
      I1=I1+IDIM
      I2=I1+ILM
   43 WRITE(6,100) (SIKLP(LIN),LIN=ILM,I2,IDIM)
      WRITE(6,101)
C
   30 CONTINUE
      IF(NQ.EQ.1) RETURN
C
C     REPEAT FIRST DIAGONAL BLOCK
C
      JQQ=0
      DO 24 JQ=2,NQ
      JQQ=JQQ+(1+IDIM)*NLM
      J1=-IDIM
      DO 24 JLM=1,NLM
      J1=J1+IDIM
      DO 24 ILM=JLM,NLM
      LIN=J1+ILM
      LINQ=JQQ+LIN
      SRKLP(LINQ)=SRKLP(LIN)
   24 SIKLP(LINQ)=SIKLP(LIN)
      NROP=NRO+1
C
      DO 29 I=NROP,NUMVR
      PRD=PKX*ASX(I)+PKY*ASY(I)+PKZ*ASZ(I)
   29 CXPRDK(I)=CDEXP(CIM*PRD)
C
C     QQP OFF DIAGONAL BLOCKS
C
      NQM=NQ-1
      JQQ=-NLM*IDIM
      DO 20 JQ=1,NQM
      JQP=JQ+1
      JQQ=JQQ+NLM*IDIM
      QPX=QX(JQ)
      QPY=QY(JQ)
      QPZ=QZ(JQ)
      DO 20 IQ=JQP,NQ
      IUQ=(IQ-1)*NLM+JQQ
      QPPX=QX(IQ)-QPX
      QPPY=QY(IQ)-QPY
      QPPZ=QZ(IQ)-QPZ
      DO 36 I=1,NUMVR
      X=ASX(I)-QPPX
      Y=ASY(I)-QPPY
```

```
      Z=ASZ(I)-QPPZ
      D=DSQRT(X*X+Y*Y+Z*Z)
      DRQ(I)=D
      IF(D.GT.RMAX) GO TO 36
      ALFA=ALAMDA*D
      USX(I)=X/D
      USY(I)=Y/D
      USZ(I)=Z/D
C
C     CONVERGENCE FUNCTION, REAL SPACE
C
      CALL GAMFC(ALFA,GLH)
      DO 37 LP=1,NL2
   37 GLHS(I,LP)=GLH(LP)
   36 CONTINUE
C
      DO 38 I=NGST,NUMVG
      D=DG(I)
      IF(D.GT.GMAX) GO TO 38
      BDOTQ(I)=(UKX(I)*QPPX+UKY(I)*QPPY+UKZ(I)*QPPZ)*D
      BETA=D/TWOLAM
      BETASQ=BETA*BETA
C
C     CONVERGENCE FUNCTION, RECIP. SPACE
C
      DO 39 LP=1,NL2
      L=LP-1
   39 FBLN(I,LP)=BETA**(L-2)/EXP(BETASQ)
   38 CONTINUE
C
C     EVALUATION OF LATTICE SUMS FOR QPP .NE. 0
C
      DO 46 KLM=1,KLM0
      SUMR(KLM)=DCMPLX(0.D00,0.D00)
   46 SUMG(KLM)=DCMPLX(0.D00,0.D00)
C
C     REAL SPACE
C
      DO 40 I=1,NUMVR
      IF(DRQ(I).GT.RMAX) GO TO 40
      CALL YLMRK(USX(I),USY(I),USZ(I),NL2)
      KLM=0
      DO 21 LP=1,NL2
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      DO 21 M=1,NM
      KLM=KLM+1
   21 SUMR(KLM)=SUMR(KLM)+GLHS(I,LP)*YLM(KLM)*CXPPEK(I)
   40 CONTINUE
C
C     RECIP. SPACE
C
      DO 41 I=NGST,NUMVG
      IF(DG(I).GT.GMAX) GO TO 41
      CALL YLMRK(UKX(I),UKY(I),UKZ(I),NL2)
      KLM=0
      DO 47 LP=1,NL2
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      DO 47 M=1,NM
      KLM=KLM+1
   47 SUMG(KLM)=SUMG(KLM)+FBLN(I,LP)*YLM(KLM)*CDEXP(CIMAG*BDOTQ(I))
   41 CONTINUE
C
C     SET UP STRUCTURE CONSTANT MATRIX FROM THE LATTICE SUMS
```

```
C
      CIL=CIM
      KLM=0
      DO 56 LP=1,NL2
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      CIL=CIL*CCIM
      AR=SWSL**LP*2.**L/DAC(LP)/SQRTPI
      AG=FPL3OM*AR
      DO 48 M=1,NM
      KLM=KLM+1
   48 SR(KLM)=AR*SUMR(KLM)*CIL+AG*SUMG(KLM)
   56 CONTINUE
      SR(1)=SR(1)-BACKGR
C
C     INSERT INTO LOWER TRIANGLE
C
      J1=-IDIM
      J2=-IDIMC
      DO 23 JLM=1,NLM
      J1=J1+IDIM
      J2=J2+IDIMC
      L=LL(JLM)
      M=MM(JLM)
      DO 23 ILM=1,NLM
      LIN=J1+ILM
      LINC=J2+ILM
      LINQ=IQQ+LIN
      LPP=L+LL(ILM)
      MPP=MM(ILM)-M
      KLM=LPP*LPP+LPP+MPP+1
      SRC=SR(KLM)*C(LINC)
      SRKLP(LINQ)=DREAL(SRC)
   23 SIKLP(LINQ)=DIMAG(SRC)
C
      IF(ICNVRG.EQ.0) GO TO 60
C
C     TEST OF SPLITTING PARAMETERS
C
      KLM=0
      DO 61 LP=1,NL2
      NM=LP*2-1
      AR=SWSL**LP*2.**(LP-1)/DAC(LP)/SQRTPI
      AG=FPL3OM*AR
      DO 61 M=1,NM
      KLM=KLM+1
      SUMR(KLM)=SUMR(KLM)*AR
   61 SUMG(KLM)=SUMG(KLM)*AG
      WRITE(6,107)
      WRITE(6,103) (SUMR(K),K=1,KLM)
      WRITE(6,106)
      WRITE(6,103) (SUMG(K),K=1,KLM)
   60 IF(NOWRT.NE.2) GO TO 20
C
C     PRINT STRUCTURE CONSTANT MATRIX
C
      WRITE(6,104) IQ,JQ
      DO 31 ILM=1,NLM
      J1=IQQ+ILM
      J2=J1+(NLM-1)*IDIM
   31 WRITE(6,100) (SRKLP(LINQ),LINQ=J1,J2,IDIM)
      WRITE(6,101)
      DO 32 ILM=1,NLM
      J1=IQQ+ILM
      J2=J1+(NLM-1)*IDIM
```

```
   32 WRITE(6,100) (SIKLP(LIBB),LIBB=J1,J2,IBI )
   20 CONTINUE
      RETURN
      END
      SUBROUTINE CROSS(AX,AY,AZ,BX,BY,BZ,CX,CY,CZ)
C     ************************************************************
C     *                                                          *
C     *   CROSS PRODUCT (CX,CY,CZ)=(AX,AY,AZ)*(BX,BY,BZ)         *
C     *                                                          *
C     ************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C
      CX=AY*BZ-BY*AZ
      CY=BX*AZ-AX*BZ
      CZ=AX*BY-BX*AY
      RETURN
      END
      SUBROUTINE FACTOR(N)
C     ************************************************************
C     *                                                          *
C     *   CALCULATION OF FACTORIALS                              *
C     *                                                          *
C     *   FAC(N)=1*2*3*...*(N-1)                                 *
C     *                                                          *
C     *   DAC(N)=1*1*3*5*...*(2*(N-1)-1)                         *
C     *                                                          *
C     ************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,C(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,FACTCR,
     1ALANDA,TWOPI,FPL3OM,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICNVRG,NCST,
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NR0,NL2,KLM0,NL,NLM,LMQ,NOSRT,IBI1,IBINC
C
      NP=N+1
      FAC(1)=1.D0
      FAC(2)=1.D0
      DO 10 I=3,NP
   10 FAC(I)=FAC(I-1)*(I-1)
      DAC(1)=1.D0
      DAC(2)=1.D0
      DO 11 I=3,NP
   11 DAC(I)=DAC(I-1)*(2*I-3)
      RETURN
      END
      SUBROUTINE GAMFC(ALPHA,GLH)
C     ************************************************************
C     *                                                          *
C     *   CALCULATION OF CONVERGENCE FUNCTIONS                   *
C     *                                                          *
C     *   GLH = GAMMA(ALPHA**2,L+1/2)/ALPHA**(L+1)               *
C     *                                                          *
C     ************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,C(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,FACTCR,
     1ALANDA,TWOPI,FPL3OM,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICNVRG,NCST,
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NR0,NL2,KLM0,NL,NLM,LMQ,NOSRT,IBI1,IBINC
      DIMENSION GLH(9)
C
      DEL=ALPHA
      ARG=ALPHA*ALPHA
      GLH(1)=ERFCEX(ALPHA,FEX)
      FACL=0.5
C
C     INCOMPLETE GAMMA FUNCTION BY RECURSION
```

```
C
      DO 20 LP=2,NL2
      GLH(LP)=DEL+FACL*GLH(LP-1)
      DEL=DEL*ARG
   20 FACL=FACL+1.0
      FEX=1./FEX
      AINV=1.0/ALPHA
      DO 21 LP=1,NL2
      FEX=FEX*AINV
   21 GLH(LP)=GLH(LP)*FEX
      RETURN
      END
      SUBROUTINE YLMRK(XX,YY,ZZ,NLMAX)
C    ****************************************************************************
C    *                                                                          *
C    *   CALCULATES SPHERICAL HARMONICS                                         *
C    *   YLM=(DSQRT(4PI)/CYLM)*COMPLEX CONJUGATE(YLM)
C    *   CYLM IS CALCULATED IN <GAUNT>                                          *
C    *                                                                          *
C    ****************************************************************************
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 YLM,DCMPLX,CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,CC(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,BACKGR,
     1ALAMDA,TWOPI,FPL30M,SWS,VOL,SJSL,RMAX,GMAX,ICONVRG,NCST,
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NRO,NL2,KLM0,NL,NLM,LMQ,NOSRT,IDIM,IDINC
      COMMON/YLMD/YLM(81)
      COMMON/LDATA/LL(81),MM(81)
      DIMENSION PLM(45),COSMP(9),SINMP(9)
C
C     CALCULATE LEGENDRE POLYNOMIALS BY RECURSION
C
      NLP=NLMAX
      P=DSQRT(XX*XX+YY*YY)
      X=ZZ
      Y=P
      XA=DABS(X)
      IF(XA.GT.1.D-06) GO TO 10
C
C     DABS(X) = 0
C
      DO 11 LP=1,NLP
      L=LP-1
      LA=L*(L+1)/2+1
      TA=2.D0**L
      DO 11 MP=1,LP
      M=MP-1
      K=L+M
      IF(K-2*(K/2).EQ.0) GO TO 12
      J=LA+M
      PLM(J)=0.D0
      GO TO 11
   12 IA=K+1
      IB=K/2+1
      JC=(L-M)/2
      IC=JC+1
      J=LA+M
      PLM(J)=(((-1)**JC)*FAC(IA))/(TA*FAC(IB)*FAC(IC))
   11 CONTINUE
      GO TO 32
   10 IF(XA.LT.0.999999D0) GO TO 20
C
C     DABS(X) = 1
C
      PLM(1)=1.D0
```

```
      DO 13 LP=3,NLP
      L=LP-1
      J=L*(L+1)/2+1
      L2=2*L-1
      K=J-L
      M=J-L2
   13 PLM(J)=(L2*X*PLM(K)-(L-1)*PLM(M))/L
      DO 14 LP=2,NLP
      L=LP-1
      LA=L*(L+1)/2
      DO 14 MP=2,LP
      J=LA+MP
   14 PLM(J)=0.D0
      GO TO 32
C
C     0 < DABS(X) < 1
C
   20 PLM(1)=1.D0
      PLM(2)=X
      PLM(3)=Y
      PLM(5)=3.D0*Y*X
      DO 21 LP=3,NLP
      L=LP-1
      J=L*(L+1)/2+1
      L2=2*L-1
      K=J-L
      M=J-L2
   21 PLM(J)=(L2*X*PLM(K)-(L-1)*PLM(M))/L
      DO 22 LP=4,NLP
      L=LP-1
      J=L*(L+1)/2+2
      L2=2*L-1
      K=J-L
      M=J-L2
   22 PLM(J)=(L2*X*PLM(K)-L*PLM(M))/(L-1)
      DO 23 LP=3,NLP
      L=LP-1
      NM=L*2+1
      LA=L*(L+1)/2
      DO 23 MP=3,LP
      M=MP-1
      J=LA+MP
      K=J-1
      N=K-1
      A=(M-1)*2.D0*X/Y
      B=(L+M-1)*(L-M+2)
   23 PLM(J)=A*PLM(K)-B*PLM(N)
   32 CONTINUE
C
C     FORM SPHERICAL HARMONICS
C
      IF(P.GT.1.D-06) GO TO 34
      COSPHI=1.D0
      SINPHI=0.D0
      GO TO 35
   34 COSPHI=XX/P
      SINPHI=YY/P
   35 COSMP(1)=1.D0
      SINMP(1)=0.D0
      DO 33 MP=2,NLP
      COSMP(MP)=COSMP(MP-1)*COSPHI-SINMP(MP-1)*SINPHI
   33 SINMP(MP)=SINMP(MP-1)*COSPHI+COSMP(MP-1)*SINPHI
      KLM=0
      DO 36 LP=1,NLP
      L=LP-1
```

```
      NM=L*2+1
      DO 36 MP=1,NM
      KLM=KLM+1
      M=MM(KLM)
      MA=IABS(M)+1
      MB=MA-1
      LB=L*(L+1)/2+MA
      IF(M.LE.0) GO TO 37
      YLM(KLM)=PLM(LB)*DCMPLX(COSMP(MA),-SINMP(MA))
      GO TO 36
   37 YLM(KLM)=PLM(LB)*DCMPLX(COSMP(MA),SINMP(MA))
   36 CONTINUE
      RETURN
      END
      SUBROUTINE GAUNT
C    ************************************************************************
C    *                                                                      *
C    *    CALCULATION OF GAUNT COEFFICIENTS                                 *
C    *                                                                      *
C    ************************************************************************
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,CC(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,SA(KGM,
     1ALAMDA,TWOPI,FPL3OM,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICONVG,COST,
     2NUMVR,NUMVG,NG,NR0,NL2,KLM0,NL,NLM,LMG,NOGRT,ICIF,IDTIC
      COMMON/LDATA/LL(81),MM(81)
      DIMENSION CYLM(45)
C
      IDIMC=25
C
C     CYLM = (-1)**M*DSQRT((2L+1)(L-M)!/(L+M)!)
C
      DO 20 LP=1,NL2
      L=LP-1
      LA=L*(L+1)/2
      NM=L*2+1
      DO 20 MP=1,LP
      M=MP-1
      L1=L-M+1
      L2=L+MP
      KLM=LA+MP
      ARG=NM*FAC(L1)/FAC(L2)
   20 CYLM(KLM)=DSQRT(ARG)*(-1)**M
C
C     CALCULATE CYLM*GAUNT COEFFICIENTS
C
      DO 21 ILM=1,NLM
      LP=LL(ILM)
      MP=MM(ILM)
      DO 21 JLM=1,NLM
      L=LL(JLM)
      M=MM(JLM)
      LPP=LP+L
      MPP=MP-M
      MPPA=IABS(MPP)
      KLM=LPP*(LPP+1)/2+MPPA+1
C
C     SIGN OF YLM FOR M .LT. 0
C
      ISIGN=1
      IF(MPP.LT.0) ISIGN=(-1)**MPPA
      LPM=LPP+MPP+1
      L1M=LPP-MPP+1
      LM1P=LP+MP+1
      LM1M=LP-MP+1
```

```
      LM2P=L+M+1
      LM2M=L-M+1
      SETN=FAC(LPM)*FAC(LIM)
      SETD=FAC(LM1P)*FAC(LM1M)*FAC(LM2P)*FAC(LM2M)
      SET3=(2*LP+1)*(2*L+1)
      SET4=(2*LPP+1)
      SETF=SET3*SETN/SET4/SETD
   21 CC(ILM,JLM)=((-1)**(M+1))*ISIGN*CYLM(KLM)*DSQRT(SETF)*2.D00
      RETURN
      END
      SUBROUTINE MADL
C    ******************************************************************
C    *                                                                *
C    *   CALCULATES MADELUNG CONSTANTS                                *
C    *                                                                *
C    ******************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,C(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,[illegible],
     1ALAMDA,TWOPI,FPL3OM,SWS,VOL,SWSL,RMAX,[illegible],ICONVG,[illegible],
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NRO,NL2,KLMO,NL,NLM,L[illegible],[illegible],IB[illegible],IOI[illegible]
      COMMON/VEC/BSX(3),BSY(3),BSZ(3),BKX(3),BKY(3),BKZ(3),QX(6),QY(6),
     1QZ(6),ASX(500),ASY(500),ASZ(500),AKX(500),AKY(500),AKZ(500),
     2DR(500),DG(500),
     3USX(500),USY(500),USZ(500),UKX(500),UKY(500),UKZ(500)
      DIMENSION VMADL(6,6)
C
    1 FORMAT(1H ,10X,'AMADL =',F16.8,/)
    2 FORMAT(1H ,10X,6F12.8)
      ALAMSQ=ALAMDA*ALAMDA
      FACTOR=TWOPI/VOL/ALAMSQ/2.
C
C     QPP .EQ. 0
C
      SUMG=0.
      DO 20 I=2,NUMVG
      DGSQ=DG(I)**2
      BETASQ=DGSQ/4./ALAMSQ
      SUMG=SUMG+EXP(-BETASQ)/BETASQ
   20 CONTINUE
C
      AMADL=FACTOR*(1.-SUMG)
C
      SUMR=0.
      DO 21 I=2,NRO
      DRI=DR(I)
      ALPHA=ALAMDA*DRI
      ERFC=ERFCEX(ALPHA,EXPSQ)
      ERFC=ERFC/EXPSQ/SQRTPI
      IF(ALPHA.GE.10.0D00) ERFC=0.D00
      SUMR=SUMR+ERFC/DRI
   21 CONTINUE
C
      AMADL=AMADL+2.*ALAMDA/SQRTPI-SUMR
      DO 22 IQ=1,NQ
   22 VMADL(IQ,IQ)=AMADL*SWS*2.
      IF(NQ.EQ.1)  GO TO 26
C
C     QPP .NE. 0
C
      NQM=NQ-1
      DO 23 JQ=1,NQM
      JQP=JQ+1
      QPX=QX(JQ)
      QPY=QY(JQ)
```

```
      QPZ=QZ(JQ)
      DO 23 IQ=JQP,NQ
      QPPX=QX(IQ)-QPX
      QPPY=QY(IQ)-QPY
      QPPZ=QZ(IQ)-QPZ
      SUMG=0.
      DO 24 I=2,NUMVG
      DGSQ=DG(I)**2
      GDOTQ=AKX(I)*QPPX+AKY(I)*QPPY+AKZ(I)*QPPZ
      BETASQ=DGSQ/4./ALAMSQ
      SUMG=SUMG+EXP(-BETASQ)/BETASQ*COS(GDOTQ)
   24 CONTINUE
C
      AMADL=FACTOR*(1.-SUMG)
C
      SUMR=0.
      DO 25 I=1,NUMVR
      X=ASX(I)-QPPX
      Y=ASY(I)-QPPY
      Z=ASZ(I)-QPPZ
      DRI=DSQRT(X*X+Y*Y+Z*Z)
      IF(DRI.GT.RMAX) GO TO 25
      ALPHA=ALAMDA*DRI
      ERFC=ERFCEX(ALPHA,EXPSQ)
      ERFC=ERFC/EXPSQ/SQRTPI
      IF(ALPHA.GE.9.9D00) ERFC=0.D00
      SUMR=SUMR+ERFC/DRI
   25 CONTINUE
      AMADL=AMADL-SUMR
      VMADL(IQ,JQ)=AMADL*SWS*2.
   23 CONTINUE
C
   26 AMADL=0.
      DO 27 IQ=1,NQ
   27 AMADL=AMADL+VMADL(IQ,1)/2.
      WRITE(6,1) AMADL
      DO 28 IQ=1,NQ
   28 WRITE(6,2) (VMADL(IQ,JQ),JQ=1,IQ)
      RETURN
      END
      FUNCTION ERFCEX(Z,EXZZ)
C   **************************************************************************
C   *
C   *   CALCULATES COMPLEMENTARY ERRORFUNCTION TIMES
C   *   DSQRT(PI) TIMES EXP(Z*Z)
C   *
C   **************************************************************************
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMPLEX*16 CIM,CCIM
      COMMON/B1/CIM,CCIM,C(25,25),FAC(17),DAC(17),SQRTPI,DACRIP,
     1ALAMDA,TWOPI,FPL30M,SWS,VOL,SWSL,RMAX,GMAX,ICONVG,NEST,
     2NUMVR,NUMVG,NQ,NRO,NL2,KLMO,NL,NLM,LOO,QOORT,ISIH,IOIH
      DATA BOUND/3.E-11/
      ZZ=Z*Z
CC      IF(ZZ.GE.98.D00) GO TO 7342
      EXZZ=EXP(ZZ)
CC      GO TO 7343
CC 7342 CONTINUE
CC      EXZZ=10.D00
CC 7343 CONTINUE
C
C     CHOOSE ALGORITHM
C
      IF(Z.LT.1.5) GO TO 100
C
```

```
C       CONTINUED FRACTION EXPANSION : ABRAMOWITZ P. 298, EQ. (7.1.14)
C
        U=1.0D00
        V=0.0D00
        X=Z
        Y=1.0D00
        Q=0.5D00
        F=(U+V*Q)/(X+Y*Q)
      1 UA=U
        U=U*Z+V*Q
        V=UA
        XA=X
        X=X*Z+Y*Q
        Y=XA
        Q=Q+0.5
        FA=F
        F=(U+V*Q)/(X+Y*Q)
        IF(DABS(FA-F).GT.BOUND*F) GO TO 1
        ERFCEX=F
        RETURN
    100 Z2=2.0*ZZ
        ERF1=Z
        RATIO=1.0
        TERM=Z
      2 RATIO=RATIO+2.0
        TERM=TERM*Z2/RATIO
        ERF1=ERF1+TERM
        IF(TERM.GT.BOUND) GO TO 2
        ERFCEX=SQRTPI*EXZZ-2.0*ERF1
        RETURN
        END
        SUBROUTINE PRIMV(LAT,IPRIM)
C     ***********************************************************************
C     *                                                                     *
C     *    CONSTRUCT PRIMITIVE TRANSLATIONAL VECTORS OF REAL SPACE          *
C     *    FROM THE CRYSTALLOGRAPHIC DATA : A,B,C,ALPHA,BETA,GAMMA          *
C     *    IF IPRIM = 0 : READ PRIMITIVE VECTORS                            *
C     *                                                                     *
C     ***********************************************************************
        IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
        COMMON/MSH/DKX,DKY,DKZ,DHX,BOA,COA,ALF,BET,GAM,TKX(3),TKY(3),
       1TKZ(3),KX(2500),KY(2500),KZ(2500),W(2500)
        COMMON/VEC/BSX(3),BSY(3),BSZ(3),BKX(3),BKY(3),BKZ(3),QX(6),QY(6),
       1QZ(6),ASX(500),ASY(500),ASZ(500),AKX(500),AKY(500),AKZ(500),
       2DR(500),DG(500),
       3USX(500),USY(500),USZ(500),UKX(500),UKY(500),UKZ(500)
      1 FORMAT(' THIS PART OF PRIMV NOT OPERATIONAL FOR LAT =',I4)
    102 FORMAT(I5,2E15.8)
    103 FORMAT(3F10.6)
    104 FORMAT(3E15.7)
    105 FORMAT('0',10X,'A,B,C',3F10.6,/,11X,'ALPHA,BETA,GAMMA',3F8.4,/)
C
        IF(IPRIM.EQ.0) GO TO 24
C
C       CONSTRUCT PRIMITIVE VECTORS FROM A,B,C,ALPHA,BETA,GAMMA
C
        PI=4.*DTAN(1.D00)
        RADF=PI/180.
CC      READ(5,2)LAT
        READ(5,'(4X,I2)') LAT
        READ(5,103) A,B,C
        READ(5,103) ALPHA,BETA,GAMMA
        WRITE(6,105) A,B,C,ALPHA,BETA,GAMMA
        BOA=B/A
        COA=C/A
```

```
      ALF=ALPHA*RADF
      BET=BETA*RADF
      GAM=GAMMA*RADF
      GO TO (99,2,3,4,99,99,16,99,99,99,99,99,22,99) LAT
C
C     FACE CENTERED CUBIC
C
    2 BSX(1)=0.5D00
      BSY(1)=0.5D00
      BSZ(1)=0.D00
      BSX(2)=0.D00
      BSY(2)=0.5D00
      BSZ(2)=0.5D00
      BSX(3)=0.5D00
      BSY(3)=0.D00
      BSZ(3)=0.D00
      RETURN
C
C     BODY CENTERED CUBIC
C
    3 BSX(1)=0.5D00
      BSY(1)=0.5D00
      BSZ(1)=-0.5D00
      BSX(2)=-0.5D00
      BSY(2)=0.5D00
      BSZ(2)=0.5D00
      BSX(3)=0.5D00
      BSY(3)=-0.5D00
      BSZ(3)=0.5D00
      RETURN
C
C     HEXAGONAL
C
    4 BSX(1)=1.D00
      BSY(1)=0.D00
      BSZ(1)=0.D00
      BSX(2)=-0.5D00
      BSY(2)=DSQRT(3.D00)/2.D00
      BSZ(2)=0.D00
      BSX(3)=0.D00
      BSY(3)=0.D00
      BSZ(3)=COA
      RETURN
C
C     TRIGONAL
C
   16 BSX(1)=0.D00
      BSY(1)=1.D00
      BSZ(1)=COA
      BSX(2)=-DSQRT(3.D00)/2.
      BSY(2)=-0.5D00
      BSZ(2)=COA
      BSX(3)=DSQRT(3.D00)/2.
      BSY(3)=-0.5D00
      BSZ(3)=COA
      RETURN
C
C     BASE CENTRED MONOCLINIC
C
   22 BSX(1)=0.D00
      BSY(1)=-BOA
      BSZ(1)=0.D00
      BSX(2)=0.5*DSIN(GAM)
      BSY(2)=-0.5*DCOS(GAM)
      BSZ(2)=-0.5*COA
```

```
      BSX(3)=0.5*DSIN(GAM)
      BSY(3)=-0.5*DCOS(GAM)
      BSZ(3)=0.5*COA
      RETURN
C
C     READ PRIMITIVE VECTORS ON FILE 5
C
   24 READ(5,102) LAT,BOA,COA
      DO 25 I=1,3
   25 READ(5,104) BSX(I),BSY(I),BSZ(I)
      IF(LAT.EQ.7.AND.BSZ(1).LT.1.D-07) BOA=-1.
      RETURN
   99 WRITE(6,1) LAT
      STOP
      END
      SUBROUTINE MESH(LAT,NPX,NPY,NPZ,NPT)
C    *************************************************************************
C    *                                                                       *
C    *   CONSTRUCTION OF MESH IN K-SPACE                                     *
C    *                                                                       *
C    *   HERE K-VECTORS ARE IN UNITS OF PI/A                                 *
C    *                                                                       *
C    *************************************************************************
C    *                                                                       *
C    *   LAT=1  SIMPLE CUBIC                                                 *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=2  FACE CENTRED CUBIC                                           *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=3  BODY CENTRED CUBIC                                           *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=4  HEXAGONAL CLOSE PACKED                                       *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=5  SIMPLE TETRAGONAL                                            *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=6  BODY CENTRED TETRAGONAL                                      *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=7  TRIGONAL                                                     *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=8  SIMPLE ORTHOROMBIC                                           *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=9  BASE CENTRED ORTHOROMBIC                                     *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=10 BODY CENTRED ORTHOROMBIC                                     *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=11 FACE CENTRED ORTHOROMBIC                                     *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=12 SIMPLE MONOCLINIC                                            *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=13 BASE CENTRED MONOCLINIC                                      *
C    *                                                                       *
C    *   LAT=14 SIMPLE TRICLINIC                                             *
C    *                                                                       *
C    *************************************************************************
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      INTEGER X,Y,Z
      COMMON/MSH/DKX,DKY,DKZ,DHX,BOA,COA,ALF,BET,GAM,IKX(3),IKY(3),
     1IKZ(3),KX(2500),KY(2500),KZ(2500),WM(2500)
    1 FORMAT(1H ,10X,'NUMBER OF POINTS ON MESH EXEEDS DIMENSION OF ARRA
     1S',2I5)
    2 FORMAT(1H ,'*** WRONG NPY, NPY =',I4,'   ***')
    3 FORMAT(1H ,'*** WRONG NPZ, NPZ =',I4,'   ***')
    4 FORMAT(1H ,'*** WRONG NPX, NPX =',I4,'   ***')
C
      NDIM=2500
      NPXM=NPX-1
```

```
      NPYM=NPY-1
      NPZM=NPZ-1
      GO TO (10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,23),[illegible]
   10 NP=0
C
C     SIMPLE CUBIC IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. KZ .LE. KX .LE. KY .LE. PI/A
C
      DKX=1.D0/NPYM
      DKY=DKX
      DKZ=DKX
      DHX=0.D0
      DO 30 J=1,NPY
      Y=J-1
      DO 30 I=1,J
      X=I-1
      DO 30 K=1,I
      Z=K-1
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=48.D0
      IF(X.EQ.Y.OR.X.EQ.Z.OR.Y.EQ.Z) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.Y.AND.Y.EQ.Z) W=W/3.D0
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(X+Y+Z.EQ.3*NPYM) W=1.D0
      IF(X+Y+Z.EQ.0) W=1.D0
      WW(NP)=W
   30 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   11 NP=0
C
C     FCC IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. KZ .LE. KX .LE. KY .LE. 2PI/A
C     KX + KY + KZ .LE. 3PI/A
C
      IF(NPYM.NE.4*(NPYM/4)) GO TO 996
      DKX=2.D0/NPYM
      DKY=DKX
      DKZ=DKX
      DHX=0.D0
      NPPX=NPY
      NPH=NPY/2+1
      NPTH=(NPYM/2)*3
      DO 31 I=1,NPPX
      Y=I-1
      M1=NPPX-I+NPH
      NQY=MIN0(I,M1)
      DO 31 J=1,NQY
      X=J-1
      M5=M1-J+1
      NPPZ=MIN0(J,M5)
      DO 31 K=1,NPPZ
      Z=K-1
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
```

```
      W=48.D0
      IF(X.EQ.Y.OR.X.EQ.Z.OR.Y.EQ.Z) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.Y.AND.Y.EQ.Z) W=W/3.D0
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(X+Y+Z.EQ.NPTH) W=W/2.D0
      IF(X+Y+Z.EQ.0) W=1.D0
      WW(NP)=W
   31 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   12 NP=0
C
C     BCC IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. KZ .LE. KY .LE. KX .LE. 2PI/A
C     KX + KY .LE. 2PI/A
C
      IF(NPYM.NE.2*(NPYM/2)) GO TO 998
      DKX=2.D0/NPYM
      DKY=DKX
      DKZ=DKX
      DHX=0.D0
      NPH=NPY/2+1
      NPYH=NPYM/2
      DO 32 I=1,NPY
      X=I-1
      JM=MIN0(I,NPY-I+1)
      DO 32 J=1,JM
      Y=J-1
      DO 32 K=1,J
      Z=K-1
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=48.D0
      IF(X.EQ.Y.OR.X.EQ.Z.OR.Y.EQ.Z) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.Y.AND.Y.EQ.Z) W=W/3.D0
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X+Y.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.Z.AND.X+Y.EQ.NPYM) W=8.D0
      IF(Z.EQ.NPYH) W=2.D0
      IF(X.EQ.NPYH) W=1.D0
      IF(X+Y+Z.EQ.0) W=1.D0
      WW(NP)=W
   32 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   13 NP=0
C
C     HEXAGONAL CLOSE PACKED IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. 2KY .LE. KX .LE. 4/3 PI/A
C     0 .LE. KZ .LE. A/C PI/A
C
      IF(NPYM.NE.2*(NPYM/2)) GO TO 998
      NPYH=NPYM/2
      NPH=NPY/2+1
      NPZM=NPZ-1
      AOC=1.D0/COA
      DKX=4.D0/3.D0/NPYM
      DKY=DSQRT(3.D0)/2.D0*DKX
      DKZ=AOC/NPZM
```

```
      DHX=-0.5D0*DKX
      DO 33 K=1,NPZ
      Z=K-1
      DO 33 J=1,NPH
      Y=J-1
      IM=2*Y+1
      DO 33 I=IM,NPY
      X=I-1
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=24.D0
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.0) W=W/3.D0
      IF(X.EQ.2*Y) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.NPZM) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.NPYM.AND.Y.EQ.0) W=W/3.D0
      IF(X.EQ.NPYM.AND.Y.NE.0) W=W/2.D0
      IF(X+Y+Z.EQ.0) W=1.D0
      IF(X+Y.EQ.0.AND.Z.EQ.NPZM) W=1.D0
      WW(NP)=W
   33 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   14 NP=0
C
C     SIMPLE TETRAGONAL IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. KY .LE. KX .LE. PI/A
C     0 .LE. KZ .LE. A/C PI/A
C
      AOC=1.D0/COA
      DKX=1.D0/NPYM
      DKY=DKX
      DKZ=AOC/NPZM
      DHX=0.D0
      DO 34 I=1,NPY
      X=I-1
      DO 34 J=1,I
      Y=J-1
      DO 34 K=1,NPZ
      Z=K-1
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=16.D0
      IF(X.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.Y) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.NPZM) W=W/2.D0
      WW(NP)=W
   34 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   15 NP=0
C
C     BODY CENTRED  TETRAGONAL IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. KY .LE. KX .LE. PI/A
```

```
C       0 .LE. KZ .LE. 2*A/C PI/A
C
        IF(NPZM.NE.2*(NPZM/2)) GO TO 997
        AOC=1.D0/COA
        DKX=1.D0/NPYM
        DKY=DKX
        DKZ=2.D0*AOC/NPZM
        DHX=0.D0
        DO 35 I=1,NPY
        X=I-1
        DO 35 J=1,I
        Y=J-1
        DO 35 K=1,NPZ
        Z=K-1
        NP=NP+1
        IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
        KX(NP)=X
        KY(NP)=Y
        KZ(NP)=Z
        W=16.D0
        IF(X.EQ.0) W=W/2.D0
        IF(Y.EQ.0) W=W/2.D0
        IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
        IF(X.EQ.Y) W=W/2.D0
        IF(X.EQ.NPYM) W=W/2.D0
        IF(Y.EQ.NPYM) W=W/2.D0
        IF(Z.EQ.NPZM) W=W/2.D0
        NW(NP)=W
     35 CONTINUE
        NPT=NP
        RETURN
     16 NP=0
C
C       TRIGONAL IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C
C       1) TRIGONAL PRIMITIVE TRANSLATIONS
C       0 .LE. 2 KY .LE. KX .LE. 4/(3 DSQRT(3)) PI/A
C       -A/C PI/A .LE. KZ .LE. A/C PI/A
C
C       2) HEXAGONAL PRIMITIVE TRANSLATIONS
C       0 .LE. 2 KY .LE. KX .LE. 4/3 PI/A
C       -A/C PI/A .LE. KZ .LE. A/C PI/A
C
        IF(NPYM.NE.2*(NPYM/2)) GO TO 998
        IF(NPZM.NE.2*(NPZM/2)) GO TO 997
        IF(BOA.GT.0.D0.AND.NPZM.NE.6*(NPZM/6)) GO TO 997
        AOC=1.D0/COA
        NPYH=NPYM/2
        NPH=NPY/2+1
        NPZH=NPZM/2
        NPZM=NPZ-1
        DKX=4.D0/3.D0/NPYM
        IF(BOA.GT.0.D0) DKX=DKX/DSQRT(3.D0)
        DKY=DSQRT(3.D0)/2.D0*DKX
        DKZ=2.D0*AOC/NPZM
        DHX=-0.5D0*DKX
        DO 37 K=-NPZH,NPZH
        Z=K
        DO 37 J=1,NPH
        Y=J-1
        IM=2*Y+1
        DO 37 I=IM,NPY
        X=I-1
        NP=NP+1
        IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
```

```
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=12.D0
      IF(X.EQ.0) W=W/3.D0
      IF(Y.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.-NPZH) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.2*Y) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.NPZH) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.NPYM.AND.Y.EQ.0) W=W/3.D0
      IF(X.EQ.NPYM.AND.Y.NE.0) W=W/2.D0
      WW(NP)=W
   37 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
C
   17 NP=0
C
C     PRIMITIVE ORTHOROMBIC
C
      RETURN
C
   18 NP=0
C
C     BASE CENTRED ORTHOROMBIC IRREDUCIBLE ZONE DEFINED BY
C     0 .LE. KX .LE. PI/A
C     0 .LE. KY .LE. 2 PI/B
C     0 .LE. KZ .LE. PI/C
C
      AOC=1.D0/COA
      DKX=1.D0/NPXM
      DKY=2.D0/BOA/NPYM
      DKZ=AOC/NPZM
      DHX=0.D0
      DO 36 I=1,NPX
      X=I-1
      DO 36 J=1,NPY
      Y=J-1
      DO 36 K=1,NPZ
      Z=K-1
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=8.D0
      IF(X.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.D0
      IF(X.EQ.NPXM) W=W/2.D0
      IF(Y.EQ.NPYM) W=W/2.D0
      IF(Z.EQ.NPZM) W=W/2.D0
      WW(NP)=W
   36 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   19 NP=0
C
C     BODY CENTRED ORTHOROMBIC
C
      RETURN
   20 NP=0
C
C     FACE CENTERD ORTHOROMBIC
```

```
      RETURN
   21 NP=0
C
C     SIMPLE MONOCLINIC
C
      RETURN
   22 NP=0
C
C     BASE CENTRED MONOCLINIC
C
      IF(NPXM.NE.2*(NPXM/2)) GO TO 996
      IF(NPYM.NE.2*(NPYM/2)) GO TO 998
      NPYH=NPYM/2
      TKX(1)=2./SIN(GAM)/NPXM
      TKY(1)=0.
      TKZ(1)=0.
CC      TKX(2)=2.* COTAN(GAM)/BOA/NPYM
      COTAN=1./(TAN(GAM))
      TKX(2)=2.* COTAN/BOA/NPYM
      TKY(2)=2.0/BOA/NPYM
      TKZ(2)=0.
      TKX(3)=0.
      TKY(3)=0.
      TKZ(3)=2./COA/NPXM
      DO 38 I=1,NPX
      X=I-1
      KM=1+NPX-I
      DO 38 K=1,KM
      Z=K-1
      DO 38 J=-NPYH,NPYH
      Y=J
      NP=NP+1
      IF(NP.GT.NDIM) GO TO 999
      KX(NP)=X
      KY(NP)=Y
      KZ(NP)=Z
      W=4.00
      IF(X.EQ.0) W=W/2.
      IF(Z.EQ.0) W=W/2.
      IF(X+Z.EQ.NPXM) W=W/2.
      IF(Y.EQ.-NPYH) W=W/2.
      IF(Y.EQ.NPYH) W=W/2.
      WW(NP)=W
   38 CONTINUE
      NPT=NP
      RETURN
   23 NP=0
C
C     SIMPLE TRICLINIC
C
      RETURN
  996 WRITE(6,4) NPX
      STOP
  997 WRITE(6,3) NPZ
      STOP
  998 WRITE(6,2) NPY
      STOP
  999 WRITE(6,1) NP,NDIM
      STOP
      END
      SUBROUTINE KTRNSF(LAT,K1,K2,K3,PKX,PKY,PKZ)
C    ************************************************************************
C    *                                                                      *
C    *    TRANSFORMATION FROM SYMMETRY TO RECTANGULAR COORDINATES           *
C    *                                                                      *
```

```
C     ****************************************************************************
        IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
        COMMON/MSH/DKX,DKY,DKZ,DHX,DOA,COA,ALF,BET,GAM,TKX(3),TKY(3),
       1TKZ(3),KX(2500),KY(2500),KZ(2500),M(2500)
C
        GO TO (21,21,21,21,21,21,21,21,21,21,21,21,22,21),LAT
     21 PKX=DKX*K1+DHX*K2
        PKY=DKY*K2
        PKZ=DKZ*K3
        DK=PKX*PKX+PKY*PKY+PKZ*PKZ
        IF(DK.LT.1.D-08) GO TO 20
        RETURN
     22 PKX=K1*TKX(1)+K2*TKX(2)+K3*TKX(3)
        PKY=K1*TKY(1)+K2*TKY(2)+K3*TKY(3)
        PKZ=K1*TKZ(1)+K2*TKZ(2)+K3*TKZ(3)
        DK=PKX*PKX+PKY*PKY+PKZ*PKZ
        IF(DK.LT.1.D-08) GO TO 20
        RETURN
C
C       AVOID (0,0,0)
C
     20 PKX=0.D0
        PKY=0.D0
        PKZ=0.01D0
        RETURN
        END
```