

分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理計算、格子振動
開発者	山本武範、大野隆央
作成年月	2004年3月
コード名	PHASE
使用言語	Fortran90

◇第一原理擬ポテンシャルバンド計算プログラム (PHASE) の機能拡大II：格子基準振動への応用

プログラムソース、使用説明書、および基本的な計算結果などの資料とともに、「フリーソフトウェア」として昨年度公開したプログラム (PHASE) は、擬ポテンシャルと平面波展開による標準的第一原理バンド計算プログラムである。PHASE は原子の座標と原子種を入力として、全エネルギー、原子に働く力、また、各エネルギー準位についての波動関数を出力する。

格子の基準振動は原子の微小変位が周りの原子に及ぼす力のマトリックスを対角化することによってえられる。したがって、従来の PHASE が出力する原子に働く力を用いて計算可能である。しかし、PHASE が出力する力には微小ではあるが数値誤差の混入が避けられない。このため、時として結晶の対称性を破る基準振動が得られる場合があった。今回の拡張機能は PHASE が出力する力に対称性を考慮した補正を加えることによって、正しい基準振動が得られるようにしたものである。格子基準振動は原子の有効電荷と結合することにより、格子系誘電関数を与える重要な物理量である。

◇プログラムの概要

PHASE は Fortran90 を使ってモジュール化され、mpi により並列化されており、次のような特徴を持つ。とくに、項番(4)は機能拡張した格子基準振動部分の特徴である。

- (1) 計算対象となる物理系の構造と計算順序に対応した、演算やデータ構造 (モジュール構造) の階層化。これにより機能の追加などの作業を分担して行うことがより容易になる。
- (2) 入力データ、計算内容に応じた配列の動的な確保。ひとつの実行ファイルであらゆる計算対象に対応することができる (つまり計算対象毎にコンパイルする必要がない)。
- (3) 波動関数に関する並列化軸を k 点とバンド (エネルギー固有値) と二重に持っており、使用できる計算機の数と適合するように、 k 点とバンドの分割を計算の実行時に割り振ることができる。

(4) 原子に働く力が結晶の対称性を満たすように補正を加えることによって正しい格子基準振動が求まる。

本ソフトウェアは文部科学省ITプログラム「戦略的ソフトウェアの開発」プロジェクトのもとで開発された。本プロジェクトのWEBページ (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より2004年6月に公開を予定している。

◇計算例

α -quartz(水晶)の格子振動解析を PHASE の振動解析機能を使用して行った。図1は freq.pl を用いて作成した。図1は各規約表現に分類した、振動数のレベル図である。代表的な振動モードの固有ベクトルを図2(a)、(b)、(c)、(d)に示す。黒い球が酸素原子であり、灰色の球がシリコン原子である。矢印でモードの固有ベクトルをあらわしている。

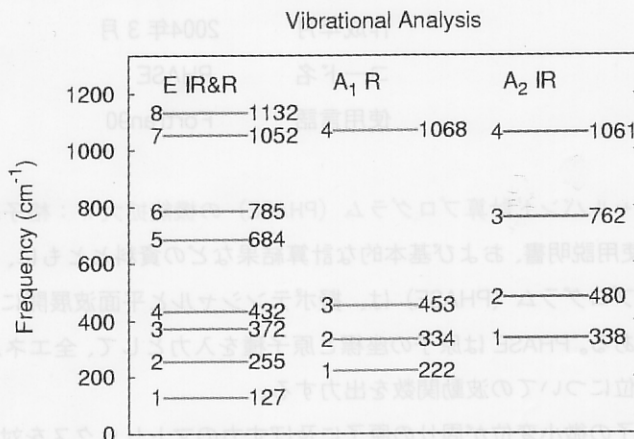


図1

