



分類	ナノシミュレーション
キーワード	統合環境
開発者	甲賀淳一郎、宇田 毅、大野隆央
作成年月	2007 年 4 月
コード名	CHASE-3PT
使用言語	Java

## 1 はじめに

CHASE-3PT は、ナノシミュレーションシステムプログラム群の統合的な操作を支援することを目的としたプログラムである。本稿では、本年度 CHASE-3PT に施した機能拡張を説明する。まずこれまでの開発実績を簡単に説明し、ついで実施した機能拡張の説明を行う。

## 2 これまでの開発実績

これまでに基本的な機能の開発は完了していると考えている。これまでに行った主な開発は以下の通り。

- 計算の入力作成、実行、解析機能の開発
- 計算用ディレクトリーの管理を行う機能の開発
- 結晶構造などの可視化を行う、原子配置ビューアーの開発
- 結晶構造データベースとの連携機能の開発
- 二次元の計算結果を表示するグラフツールの開発
- 遠隔ホストと連携して計算を実行する機能の開発

## 3 今年度の機能拡張

今年度は、上記の基本的な機能の拡張を行った。特に、内蔵の原子配置ビューアーに大幅な機能拡張を施した。また、新たなモジュールとして「逆空間ビューアー」の開発を行った。各々について説明する。

### 3.1 内蔵原子配置ビューアーの機能拡張

内蔵の原子配置ビューアーに、多くの機能を新たに実装した。以下、代表的なものを説明する。

#### 3.1.1 電荷密度可視化機能

電荷密度の可視化を行う機能を追加した。具体的には、電荷密度の等値面および等高線を描画する機能を実装した。電荷密度の等値面および等高線は、描画色や透明度の変更などが柔軟に行えるように作

成した。本機能を適用した例として、図1にシリコン結晶の電荷密度を可視化した様子を示す。

### 3.1.2 結晶の、基本格子とブラベー格子を相互変換する機能

結晶の場合、格子の取り方として基本格子とブラベー格子の二種類がある。実際の計算は通常基本格子で行うが、人間が見て理解しやすいのはブラベー格子である。また、多くの結晶構造データベースはブラベー格子でしかデータを掲載していない。そこで、これらの中で相互変換を行うことができる機能を追加した。この機能によって、特に結晶構造データベースとの連携をスムーズに行えることが期待される。

## 3.2 逆空間ビューアーの実装

CHASE-3PT が想定している系は主として周期系であり、逆空間を有している。逆空間は概念としては難しいものではないが、実際にその形状を可視化する、あるいはその座標を勘案する、などの作業は手間がかかる。そこで、結晶格子が与えられればそこから逆空間を構築し、可視化する「逆空間ビューアー」の開発を行った。以下に、開発した逆空間ビューアーが現時点で持つ主な機能を説明する。

### 3.2.1 第一ブリュアンゾーンの描画機能

結晶格子から第一ブリュアンゾーンを構築し、可視化する機能を実装した。ブラベー格子で記述された結晶であったとしても結晶の型(たとえば立方晶の場合体心あるいは面心など)を正しく与えれば描画することができる。また、これと関連して原子配置ビューアーにも結晶のウィグナー・ザイツセルを描画する機能を付け加えた。図2に、本機能を利用して面心立方格子の第一ブリュアンゾーンを可視化した様子を示す。

### 3.2.2 対称な $k$ 点の組の作成機能

バンド計算を行う場合、対応する結晶の第一ブリュアンゾーン上の対称な  $k$  点の組が必要であるが、その座標を作成する機能を作成した。この機能を利用すれば、通常手間がかかる対称  $k$  点ファイルの作成を、第一ブリュアンゾーンに描画された対称点を順次マウスクリックしていくことによって行うことができる。

### 3.2.3 フェルミ面描画機能

金属において重要な概念である、フェルミ面を描画する機能を作成した。フェルミ面は逆空間における固有エネルギーの、フェルミエネルギーでの等エネルギー面である。そこで、まずフェルミ面を描画するのに必要な、等間隔の逆空間メッシュで固有エネルギーを計算する機能を実装した。さらにその計算結果よりフェルミ面を構築し、描画する機能を実装した。本機能の適用例として、図3に銅のフェルミ面を描画した様子を示す。

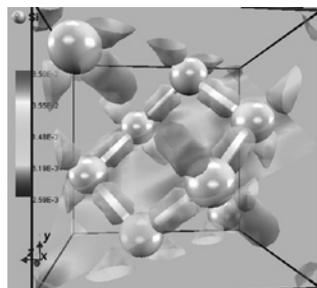


図1 シリコンの電荷密度の等値面と等高線を描画した様子

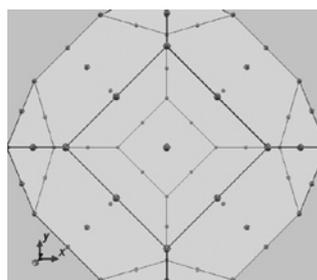


図2 面心立方格子の第一ブリュアンゾーン

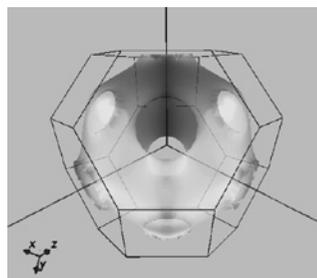


図3 銅のフェルミ面