

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発  
「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」

CISS フリーソフトウェア

# ナノ・物質・材料・マルチスケール機能シ ミュレーション

UVSOR ver.3.41

## チュートリアル・ガイド

本ソフトウェアは文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトによる成果物です。本ソフトウェアを無償でご使用になる場合「CISS フリーソフトウェア使用許諾条件」をご了承頂くことが前提となります。営利目的の場合には別途契約の締結が必要です。これらの契約で明示されていない事項に関して、或いは、これらの契約が存在しない状況においては、本ソフトウェアは著作権法など、関係法令により、保護されています。

お問い合わせ先

(公開/契約窓口)

(財) 生産技術研究奨励会

〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1

(ソフトウェア管理元)

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1

FAX: 03-5452-6662

E-mail: software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

---

### **COPYRIGHT of the program codes**

Copyright (C) 1993-2006 Hideki Katagiri, Koichi Kato, Tsuyoshi Miyazaki, Yoshitada Morikawa, Hideaki Sawada, Toshihiro Uchiyama, Tsuyoshi Uda, Takahiro Yamasaki, Noriaki Hamada, Akira Yanase, Takenori Yamamoto, Hideaki Tsukioka, Masakuni Okamoto, Hideo Mizouchi, Kiyoshi Betsuyaku and Kazuki Mae.

It is understood by the authors that the Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, distributes this program as "CISS Free Software" with users' agreement with the terms and conditions written in the file, LICENSE.pdf or LICENSE\_J.pdf (in Japanese).

### **HISTORY**

The original version of this set of the computer programs "PHASE" was developed by the members of the Theory Group of Joint Research Center for Atom Technology (JRCAT), based in Tsukuba, in the period 1993-2001. The names of the contributors to the original version are Hideki Katagiri, K. Kato, T. Miyazaki, Y. Morikawa, H. Sawada, T. Uchiyama, T. Uda and T. Yamasaki. Since 2002, this set has been tuned and new functions have been added to it as a part of the national project "Frontier Simulation Software for Industrial Science (FSIS)", which is supported by the IT program of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) of Japan. The program was developed further mainly by T. Yamasaki, T. Uda, T. Yamamoto, H. Tsukioka, M. Okamoto, H. Mizouchi, K. Betsuyaku and K. Mae contributed to the improvement of the code. The tetrahedron interpolation codes developed by N. Hamada, A. Yanase and Kiyoyuki Terakura was included. The symmetrization code developed by A. Yanase and N. Hamada was also included. The manual and tutorial were written by Makoto Itoh with the cooperation by Mineo Saito, H. Tsukioka, T. Yamamoto and T. Yamasaki. The sample calculations were prepared by T. Yamamoto, H. Tsukioka and Hiroyoshi Momida. Since 2006, this program set has been developed as a part of the national project "Revolutionary Simulation Software (RSS21)", which is supported by the next-generation IT program of MEXT of Japan. Since 2008, this program set has been developed as a part of the national project "Research and Development of Innovative Simulation Software", which is supported by the next-generation IT program of MEXT of Japan. The activity of "Multiscale Simulation System for Function Analysis of Nanomaterials", CISS, is supervised by Takahisa Ohno.

### **CONTACT ADDRESS**

Center for Research on Innovative Simulation Software The Institute of Industrial Science (IIS), The University of Tokyo  
4-6-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8505, Japan  
FAX +81-(0)3-5452-6662  
E-mail: software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp URL <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp>

\* When distributing CISS Software duplications, the user must attach the full text in this file.

---

License to Use CISS Free Software for noncommercial purposes  
Terms and Conditions of the CISS Free Software License

The Center for Research on Innovative Simulation Software (CISS) at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo gives explicit permission for anyone to use any or all of the free software that is maintained and made publicly available at the CISS site free of charge, subject to the terms and conditions detailed below.

1. Definition of CISS Free Software

CISS Free Software is any software explicitly marked " CISS Free Software " in CISS project source programs, object programs, specifications, design specifications, data, implementation results, and instruction manuals.

2. Extent of Free Use

Users may use CISS Free Software free of charge to run their own data, and use any results obtained for their own personal use. Users also have the rights to copy, to modify, and to redistribute the CISS Free Software.

3. Rules for Modification and Distribution

If the user creates a modified version of CISS Free Software by modifying the software itself, by incorporating it into other software, or any other means; then copies and/or distributes the software, the user must retain the words " CISS free software " in the name of the modified version (e.g., if the CISS free software is named ProteinDF, the new software is named \_\_\_\_\_/ProteinDF.); however, this shall not apply if the user concludes separately a contract for the purpose of profit-making business. And also the user displays a copyright notice in the modified version.

The " copyright notice " in the internal code of the CISS Free Software may not be altered for any reason, except to update or add to modification records such as altering the name of the modifier or the date of modification.

4. Copyright Notice

Users must prominently and conspicuously display the copyright notice in every CISS Free Software copy at or near the beginning of the credits along with the name of the software, the version, and the copyright holder. When distributing copies of CISS Free Software, the user must attach the full text of these Terms and Conditions without any changes.

5. User Obligations

To publicly acknowledge that results have been achieved using CISS Free Software, users are obligated to clearly display the name, version, and copyright holder, and acknowledge that "these results were achieved by using Innovative Simulation Software for an Industrial Science Project. "

If the user modifies the CISS Software and acknowledges that results were achieved using the software, the user must attach an explanation detailing how the software was modified.

We request that users report any bugs or problems they discover in using the CISS Software to the Center for Research on Innovative Simulation Software at the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo. Users may not publicly announce or disclose bugs or problems they discover in CISS software without permission.

6. Commercial Use

If a user intends to use CISS Free Software for a commercial purpose such as described in examples (1)-(3) below, the user must enter into a separate commercial license agreement before using the CISS software.

(1) A user copies and distributes CISS Free Software, then demands compensation from the recipient for the software itself as a copyrighted product or for copying and distributing the software.

(2) A user (corporate or individual) uses CISS Free Software not for personal use but to provide services to other parties, regardless of whether the services are offered gratis or for a fee.

(3) A user seeks to assume a right of pledge, a security interest, or some other form of commercial interest in CISS Free Software, including portions of the software that were modified by the user.

However, if a public entity seeks to provide services using CISS software for the purpose disseminating the software, we require an exchange of memorandums between the CISS and the entity (in lieu a conventional for-profit license agreement) detailing the nature of the service, regardless of whether the proposed service is offered gratis or for a fee. The user acknowledges in advance that if he or she violates any of the provisions of this agreement, the copyright holder of any software shall prohibit the user from using the software. The user also acknowledges in advance that the copyright holder is entitled to be compensated by an amount equivalent to any profit gained by the user through the violation of the terms of this agreement.

7. No Warranty

The Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo, the Foundation for the Promotion of Industrial Science, and other concerned parties disclaim all warranties with respect to the quality, the performance, or the results of CISS Free Software, either express or implied. The user assumes sole responsibility for the use of CISS software including any damages or losses arising out of the use of the CISS software.

8. Violations of Terms and Conditions

If a user is found to be in violation of these Terms and Conditions, he or she agrees to immediately pursue any and all steps required by the Institute of Industrial Science, the University of Tokyo to get back into compliance.

## CISS フリーソフトウェア使用許諾条件

東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター（以下 革新センター）は、次の条件や制限のもとで、革新センターで管理・公開するプロジェクト等による成果物の全てまたは一部を無償で使用することを許諾します。

1. CISS フリーソフトウェアの定義革新センター（CISS）で管理しているソースプログラム、オブジェクトプログラム、仕様書、設計書、データ、実行結果 および マニュアルなどの内、インターネット上に公開しているソフトウェアを CISS フリーソフトウェアと呼びます。

2. 無償使用の範囲利用者が CISS フリーソフトウェアを無償で使用できる行為には、自己のために CISS フリーソフトウェアを任意のデータを用いて実行する行為、その結果を利用者の自己のために使用する行為、CISS フリーソフトウェアを複製し頒布する行為、および、CISS フリーソフトウェアを改変しそれを実行する行為等を含みます。

3. 改変・頒布での遵守事項 CISS フリーソフトウェアを変更したり、他のソフトに組み込む等の行為により、改変した CISS フリーソフトウェアを複製・頒布する場合は、そのソフトウェア名には CISS フリーソフトウェアの名称を残して（例えば、CISS フリーソフトウェアの名称を ProteinDF とした場合、 / ProteinDF のようにネーミング）下さい。ただし、別途営利目的の場合における実施許諾契約を締結している場合はこの限りではありません。また、著作権表示を行うことを義務づけます。目的の如何を問わず、CISS フリーソフトウェア内部コードの『著作権表示』記載部分を修正する行為は、改変者氏名や改変日時などの改変記録を追加する場合を除き、禁止されています。

4. 著作権の表示利用者は、各々の CISS フリーソフトウェアの複製物に、ソフトウェア名・バージョン・著作者氏名などの著作権表示を表示の先頭部等の箇所に適切かつ目立つように掲載するとともに、頒布する場合は、複製物に本許諾条件の全文をそのまま添付しなければなりません。

5. 利用者義務 CISS フリーソフトウェアを利用した結果を公表する場合には、関連プロジェクト等の成果を利用した（例：『革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクトの成果を利用した』）旨を、使用した CISS ソフトウェアの名前、バージョン、著作者氏名などの記載とともに、明示して下さい。利用者が CISS ソフトウェアを改変し、その実行結果を公表する場合は、改変内容や改変履歴が特定できる説明を添付して公表しなければなりません。利用者が CISS ソフトウェアのバグや不具合を発見した場合、革新センターに報告して下さい。発見したバグや不具合を許可なく公表したり、第三者に知らせることを禁止します。

6. 営利目的に使用する場合利用者は、CISS フリーソフトウェアを下記(1)～(3)に例示するような営利目的に使用するには、事前に別途営利目的の場合における実施許諾契約を締結する必要があります。

(1) 利用者が CISS フリーソフトウェアを複製・頒布する場合、著作物としての対価のみならず、複製ないし頒布に必要な経費など経済的価値を、頒布を受ける者に対して提示ないし要求すること。(2) 法人を含み利用者は、自己の目的に限り CISS フリーソフトウェア実行が許諾されているものであり、有償無償を問わず第三者へのサービスのために CISS ソフトウェアを実行する行為をすること。(3) 利用者は、自己が改変した部分も含み、CISS フリーソフトウェアを質権や担保など、いかなる商取引の対象に加えること。

ただし、公的機関が当該ソフトウェアの普及促進を目的としてそれを利用したサービスを提供する場合は、そのサービスの有償無償を問わず、別途その内容に関して革新センターとの間で覚書等を交わすことをもって営利目的用実施許諾契約締結の代用とすることができるものとします。利用者が本項に反する行為を行った場合には、各ソフトウェア等の著作権者によりその利用を差し止められることを利用者は予め了解します。かつ、利用者は、それにより得た利益相当額の賠償をもとめられることも予め了解します。

7. 無保証 CISS フリーソフトウェアは、その品質や性能あるいは実行結果について、利用者に対してはいかなる保証もされていません。利用者は自己の責任において使用することに同意することとし、もし使用することにより損害が生じた場合には、第三者への損害や被害の修復も含み、その結果責任は全て利用者に戻ることとします。

8. 利用者が本使用許諾条件に違反した場合利用者が本使用許諾条件に違反した場合には、利用者は、革新センターがその状態を是正するために必要と認めて行う措置に無条件に従うものとします。

- 以上 -

## 目次

<b>1</b>	<b>はじめに</b>	<b>1</b>
1.1	UVSOR とはなにか	1
1.2	UVSOR の構成	1
1.3	UVSOR の特徴と機能	1
1.4	インストール・ガイド	2
1.4.1	環境の確認	2
1.4.2	パッケージの展開	2
1.4.3	UVSOR のインストール	2
<b>2</b>	<b>例題 1:Si2-電子誘電関数計算</b>	<b>3</b>
2.1	電子密度の計算	3
2.2	誘電関数の計算	3
2.2.1	ファイルの設定	3
2.2.2	入力ファイルの設定	4
2.2.3	誘電関数の計算 1	5
2.2.4	バンド数の設定法	6
2.2.5	誘電関数の計算 2	6
<b>3</b>	<b>例題 2:GaAs-格子誘電率計算</b>	<b>7</b>
3.1	はじめに	7
3.2	ベリ-位相計算	7
3.3	振動解析および格子誘電率計算	8
<b>4</b>	<b>おわりに</b>	<b>9</b>

## 表目次

## 図目次

1	誘電率の誘電分散 . . . . .	1
2	Si 結晶の誘電関数 . . . . .	6

## 1 はじめに

### 1.1 UVSOR とはなにか

UVSOR(Universal Virtual Spectroscope for Optoelectronics Research) は第一原理擬ポテンシャル法に基づいて、物質の誘電・光学応答を原子レベルで計算するプログラムです。UVSOR は、すでに公開されている第一原理電子状態計算ソフトウェア PHASE の計算結果をもとに、物質の誘電関数を 0Hz ~ 紫外波長域の周波数で計算することができます。誘電関数は、物質の電氣的・光学的性質を決定する重要な物理量で、その測定はエレクトロニクス及び光学における主要な課題です。誘電関数は分光器を用いて測定することができますが、現実の分光器は測定周波数域が限られているので、実験的に誘電関数を決定するには、いろいろな種類の分光器を使い分けます。たとえば、エレクトロニクス分野で興味がある  $10^6$ (Mega)  $10^9$ (Giga)Hz 域での誘電関数を測定するには、その周波数域の電磁波を発生させる RF(Radio Frequency) 発振器を使用します。また、光学において興味がある赤外、可視、紫外波長域における誘電関数を測定するには、それぞれの波長域専用の分光器を使用します。

しかし、発振器および分光器の調整はかならずしも容易ではなく、このことが誘電関数の測定を困難にしています。また、 $10^{12}$ (Tera)Hz 域の分光器は、現在良好に動作するものが存在しません。このため、この波長域での誘電関数測定は極めて困難であるのが現状です。

UVSOR はこのような問題を解決する材料シミュレーションソフトウェアです。解析可能な波長域が、0Hz ~ 紫外波長域の周波数と極めて広く、エレクトロニクス・光学の分野において興味あるほとんど全ての波長域における誘電関数を第一原理法に基づいて計算することができます。UVSOR は、その名が示すように、一種の”万能仮想分光器”として作用し、電子・光学材料の開発に用いることができます。

### 1.2 UVSOR の構成

図 1 は、物質の誘電関数（実部）の周波数依存性を模式的に示しています。物質の誘電率は、近似的に、物質

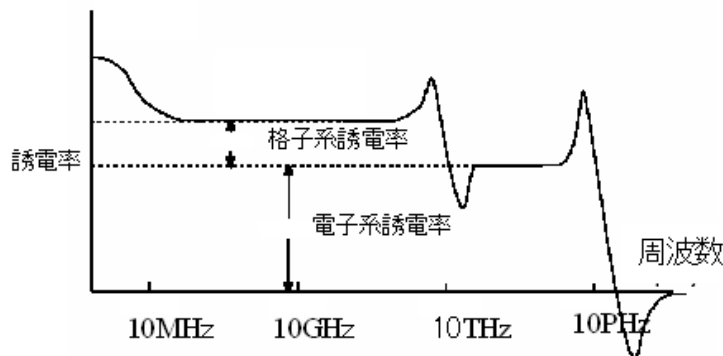


図 1: 誘電率の誘電分散

の電子状態に起因する電子誘電率と、格子振動状態に起因する格子系誘電率の和で与えられ、電磁波の周波数が 10T(Tera)Hz 以下の RF 領域では、全誘電率は電子系及び格子系誘電率の和で与えられます。一方、周波数が 10THz 以上の光学域では、電子系誘電率のみが全誘電率に寄与します。UVSOR は、2つの独立したプログラムである UVSOR-Epsilon と UVSOR-Berry-Phonon からなり、これらのプログラムはそれぞれ電子系及び格子系誘電関数を計算することができます。これらのプログラムを併用することにより、0Hz ~ 紫外域に及ぶ極めて広い周波数帯域での誘電関数を計算することができるわけです。

### 1.3 UVSOR の特徴と機能

本ガイドで紹介する UVSOR(Epsilon と Berry-Phonon) は、以下のような特徴と機能をもっています。  
UVSOR-Epsilon の特徴と機能

1. PHASE/EKCAL とファイルを共有している。このため、誘電関数の計算を容易に行うことができる。
2. PHASE の計算結果（電子密度）に基づいて電子バンド構造を計算し、電子系誘電率を計算する。

3. 複素誘電関数を計算できる。
4. ノルム保存型及びウルトラソフト型擬ポテンシャルを用いて全電子計算と同じ結果を得ることができる。
5. 半導体・絶縁体のほか、金属・磁性材料の取り扱いができる。
6. 光学スペクトル（複素屈折率、吸収係数、反射率）を偏光を考慮して計算できる。
7. MPI 並列化されている。

#### UVSOR-Berry-Phonon の特徴と機能

1. PHASE/EKCAL に組み込まれている。
2. Berry 位相計算を行い、ボルン有効電荷を計算できる。
3. 振動解析の結果とボルン有効電荷から格子誘電率を計算できる。
4. 圧電定数を計算できる。

これらの特徴・機能の詳細については、UVSOR version 3.30 ユーザマニュアルをご参照ください。それでは、さっそく UVSOR をインストールして計算を行ってみましょう。

## 1.4 インストール・ガイド

### 1.4.1 環境の確認

基本的に、UVSOR は PHASE/EKCAL が動作する環境で動くように設計されています。UVSOR は PHASE version 8.00 のソースコードを必要とします。もし、PHASE version 8.00 を入手されていない場合には、革新的シミュレーション研究センターのホームページ (<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>) よりダウンロードしてください。

### 1.4.2 パッケージの展開

UVSOR のパッケージをダウンロードすると、以下のファイルを得ることができます。

```
% uvsor_v341.tar.gz
```

以下のコマンドを実行してファイルを解凍してください。

```
% gunzip uvsor_v341.tar.gz
% tar xvf uvsor_v341.tar
```

コマンドを実行すると、以下のディレクトリが作成されます。

```
./uvsor_v341
```

このディレクトリの下位には、以下のディレクトリが存在します。

```
bin doc src samples
```

### 1.4.3 UVSOR のインストール

UVSOR は PHASE のソースコードを利用するので、UVSOR をインストールする前に、PHASE をインストールしてください。インストールを簡単にするためには、PHASE が \$HOME/phase\_v800 にインストールされているのが望ましいです。UVSOR のインストールは PHASE のインストールと同様にインストーラー `install.sh` を実行して行います。

```
% cd $HOME/uvsor_v341
% ./install.sh
```



## 2 例題 1:Si2-電子誘電関数計算

### 2.1 電子密度の計算

インストールが完了したら、テスト計算を兼ねて、シリコン結晶の誘電関数及び光学スペクトルを計算してみましょう。入力は./uvsor\_v341/samples/electron/Siにあります。./uvsor\_v341/samples/electron/Siの下位には、scf、eps及びPPという名称のディレクトリーがあります。scfはphaseによる電荷密度計算用のディレクトリ、epsはUVSOR-Epsilonによる誘電率計算用のディレクトリ、PPはSi原子の擬ポテンシャルファイルを格納するディレクトリです。

最初に、Si結晶の電子密度をPHASEで計算します。scfに移動してください。scfには以下のファイルが含まれています。

```
file_names.data
nfinput.data
```

file\_names.dataはPHASEの入出力ファイルを指定するファイルです。この入力例では、電荷密度を./nfchgt.dataに出力する設定になっています。file\_names.dataの記述に関する詳細は、PHASEのマニュアルを参照してください。

```
&fnames
F_INP    = './nfinput.data'
F_POT(1) = './PP/atom_14_Si_lda_nc_bhs.gncpp2'
F_CHGT   = './nfchgt.data'      電荷密度ファイルの設定
&end
```

nfinput.dataはPHASEによりSi結晶の電荷密度を計算するためのファイルです。計算条件は以下のように設定されています。

```
交換相関ポテンシャル：LDAPW91
バンド数：8
k点セット：メッシュ法 (4x4x4)
SCF収束条件：scf.convergence = 10-12 Hartree; succession = 3
```

使用する擬ポテンシャルは、PPに格納されているatom\_14\_Si\_lda\_nc\_bhs.gncpp2です。擬ポテンシャルの形式は以下の通りです。

```
交換相関ポテンシャル：LDAPW91
局所ポテンシャル：BHS形式
```

以下のコマンドを入力してPHASEの計算を行います。

```
% mpirun -np 1 $HOME/uvsor_v341/bin/phase >& log
```

### 2.2 誘電関数の計算

#### 2.2.1 ファイルの設定

電子密度の計算が終了したら、誘電関数の計算を行います。epsディレクトリに移動してください。このディレクトリには以下のファイルが格納されています。

```
file_names.data
nfinput.data
```

file\_names.dataはUVSORの入出力ファイル設定を行うファイル、nfinput.dataはUVSORの入力ファイルです。file\_names.dataは以下のように設定されています。

```
&fnames
F_INP    = './nfinput.data'      (1) 入力データファイルの設定
F_POT(1) = './PP/atom_14_Si_lda_nc_bhs.gncpp2' (2) 擬ポテンシャルファイルの設定
F_CHGT   = './scf/nfchgt.data'   (3) 電子密度ファイルの設定
F_EPSOUT = './eps.data'         (4) 誘電関数出力ファイルの設定
&end
```

- (1) 入力ファイルは PHASE/EKCAL と同じ形式です。入力ファイル例は次節で説明します。
- (2) 擬ポテンシャルファイルは、電子密度計算の用いたものと同じです。
- (3) scf ディレクトリで PHASE を実行して得られた電子密度ファイルを指定します。
- (4) 誘電関数用の出力ファイルです。名称は任意です。

### 2.2.2 入力ファイルの設定

nfinput.data は、以下内容となっています。

```
Control{
  condition = 2 (1) ! {0|1|2|3}|{initial|continuation|fixed_charge|fixed_charge_continuation}
  cpumax = 1 day ! {sec|min|hour|day}
  max_iteration = 6000
  use_additional_projector = off
  nfstopcheck = 1
}

accuracy{
  cke_wavefunctions = 25.0 rydberg ! cke_wf
  cke_chargedensity = 100.0 rydberg ! cke_cd
  num_bands = 18 (2)
  ksampling{
    method = mesh ! {mesh|file|directin|gamma|monk}
    mesh{ nx= 4, ny = 4, nz = 4 }
  }
  smearing{
    method = tetrahedral ! {parabolic|tetrahedral}
    width = 0.001 hartree
  }
  xctype = ldapw91 ! ldapw91
  scf_convergence{
    delta_total_energy = 1.e-12 hartree
    succession = 3 !default value = 3
  }
  force_convergence{
    delta_force = 0.1e-3
  }
  ek_convergence{
    num_extra_bands = 0
    num_max_iteration = 300
    sw_eval_eig_diff = on (3)
    delta_eigenvalue = 1.e-6 rydberg (4)
    succession = 3 (5)
  }
  initial_wavefunctions = matrix_diagon !{random_numbers|matrix_diagon}
  matrix_diagon{
    cke_wf = 20.00 rydberg ! cke_wf
  }
  initial_charge_density = file !{Gauss|Very_broad|pseudopotentialfile}
}
```

(中略)

```
epsilon {
  sw_epsilon = on a
  crystal_type = single ! {single|poly} b
  fermi_energy{
    read_efermi = off c
    efermi = 0.0000
  }
  photon{
    polar {ux=1.00, uy=0.00, uz=0.00} d
    pointing {px=0.00, py=0.00, pz=0.00}
    energy {low=0.000, high=2.000, step=0.002} e
  }
  transition_moment{
    type = ks ! {l|rn|ks} f (6)
    delq = 0.001
    symmetry = on g
  }
  BZ_integration {
    method = t !{parabolic(p)|gaussian(g)|tetrahedron(t)} h
  }
  band_gap_correction{
    scissor_operator=0.0d0 i
  }
  drude_term {
    drude = off j
  }
  ipriepsilon = 1 k
}
```

(以下略)

- (1) control タグにおいて condition=2 とします。
- (2) num\_bands を設定します。num\_bands は通常の SCF 計算の場合よりも大きな値として、1 電子あたりの振動子強度が 0.7 以上になるようにします。詳細は次節で説明します。
- (3) sw\_eval\_eig\_diff=on とします。
- (4) delta\_eigenvalue 値を設定します。delta\_eigenvalue の推奨値は、半導体・金属の場合は  $10^{-6}$  Rydberg 程度、絶縁体の場合  $10^{-4}$  Rydberg 程度です。
- (5) succession=3 とします。
- (6) epsilon タグを設定。epsilon タグで誘電関数の計算方法を指定します。epsilon タグの詳細は UVSOR ユーザマニュアルをご覧ください。

この入力例における epsilon タグの a, b, c, d, e, f, g, h, i, k の意味は以下の通りです。

- a 誘電関数の計算を行う  
sw\_epsilon=off とすると誘電関数の計算を行わないので注意してください。
- b 単結晶として計算する
- c フェルミレベルを計算する。
- d 入射電磁波は直線偏光しており、偏光ベクトルは (1.0, 0.0, 0.0)(x 軸) の方向を向いている。
- e 入射電磁波のエネルギーレンジは 0 ~ 2.0 Hartree であり、エネルギーステップは 0.002 Hartree である。
- f 遷移モーメント補正を行い、全電子計算と同じ結果が得られようにする。補正法は Kageshima-Shiraishi(KS) 法を用いる。
- g リニアテトラヘドロン法を用いて誘電率の虚部を求める。
- h scissors operator 値を 0 とする (バンドギャップの補正を行わない)。
- i 標準出力とする。

(注意) Read and Needs(RN) 法は、ノルム保存型擬ポテンシャルの場合にのみ有効です。KS 法はノルム保存及びウルトラソフト擬ポテンシャルに有効ですが、CIAO により作成された KS 補正因子 (Dipole 補正因子) を含む擬ポテンシャルファイルを使用することが必要です。詳細は、UVSOR-Epsilon 及び CIAO のマニュアルを参照ください。なお、この計算に用いる擬ポテンシャルは補正因子を含んでいます。

### 2.2.3 誘電関数の計算 1

eps ディレクトリで以下のコマンドを実行してみてください。UVSOR-Epsilon が実行されます。

```
% mpirun -np 1 $HOME/uvSOR_v341/bin/epsmain >& log &
```

計算が終わったら、電子状態の収束を確認します。収束の確認は、以下のコマンドで行うことができます。

```
% grep converged output000
```

このコマンドを実行して、!\* all k-points are converged と画面に表示されれば、電子状態は収束しています。eps.data を見てみましょう。以下のような出力が得られているはずですが。

Dielectric Function			Optical Properties			
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
Photon Energy(eV)	Real Part	Imaginary Part	n	k	abs(in $10^{**8}$ m <sup>-1</sup> )	R
0.00000	13.90891	0.00000	3.72946	0.00000	0.00000	0.33307
0.05442	13.91137	0.00000	3.72979	0.00000	0.00000	0.33310
0.10885	13.91876	0.00000	3.73079	0.00000	0.00000	0.33320
0.16327	13.93110	0.00000	3.73244	0.00000	0.00000	0.33337
0.21769	13.94843	0.00000	3.73476	0.00000	0.00000	0.33361
0.27211	13.97078	0.00000	3.73775	0.00000	0.00000	0.33392

各カラムの意味は以下の通りです。

- (1) 電磁波のエネルギー (2) 誘電関数 (実部) (3) 誘電関数 (虚部)
- (4) 屈折率 (実部) (5) 屈折率 (虚部) (6) 吸収係数 (7) 反射率

電磁波のエネルギー = 0 における誘電率が静的誘電率です。計算により得られた静的誘電率は 13.90 で、実測 (11.7) よりも大きな値となります。これは、LDA 法が Si のバンドギャップを過少評価することに起因しています。

## 2.2.4 バンド数の設定法

計算の信頼性は、計算に用いるバンド数に大きく依存します。信頼性を確認するには、1電子あたりの振動子強度の総和をしらべます。振動子強度の総和は、以下のコマンドを使用します。

```
% grep oscillator output000
```

このコマンドを実行すると

```
!* oscillator strength per electron = 0.91165
```

という表示が画面に現われます。

この表示は、この計算における1電子あたりの振動子強度の総和が約0.91であることを示しています。振動子強度の総和則(トーマス・ライヒ・クーンの総和則)は、1電子あたりの振動子強度の総和が1になることを主張します。バンド数(num\_bandsパラメータ)を増やすにつれ、oscillator strength per electronの値は1に近づいていきますが、実際の計算では、この値が0.7を越えるようにnum\_bandsを設定すれば、誘電関数はほぼ収束していることが経験的にわかっています。この例では、1電子あたりの振動子強度の総和が0.7以上となっており、バンド数は十分であることがわかります。

## 2.2.5 誘電関数の計算 2

次に、Read and Needs(RN)方式で、遷移モーメント補正を行い、Siの誘電率を計算してみましょう。epsilonタグのfの部分をもtype = rnとして、同様に計算を行ってみます。計算を行うとeps.dataが上書きされるので、コピーをとっておきます。

```
% cp eps.data eps.data-ks
```

同様に計算を行うと、以下のような結果がeps.dataに出力されます。

Dielectric Function			Optical Properties			
Photon Energy (eV)	Real Part	Imaginary Part	n	k	abs(in 10**8 m-1)	R
0.00000	13.97263	0.00000	3.73800	0.00000	0.00000	0.33395
0.05442	13.97510	0.00000	3.73833	0.00000	0.00000	0.33398
0.10885	13.98253	0.00000	3.73932	0.00000	0.00000	0.33408
0.16327	13.99492	0.00000	3.74098	0.00000	0.00000	0.33425
0.21769	14.01231	0.00000	3.74330	0.00000	0.00000	0.33449
0.27211	14.03476	0.00000	3.74630	0.00000	0.00000	0.33480

(以下略)

静的誘電率は13.97で、KS法による計算値に極めて近い値となっています。3.2.3で得られたKS補正による誘電関数と、ここで得られた誘電関数を比較してプロットすると、以下のようになります。なお図2には、比較のため、光学測定により実測された誘電関数も示してあります。

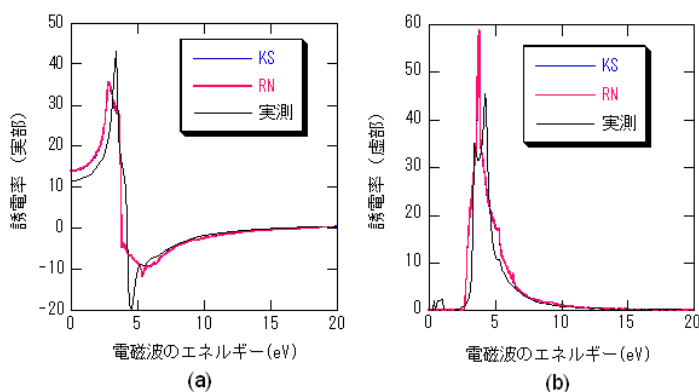


図 2: Si 結晶の誘電関数 : (a) 実部; (b) 虚部。KS 補正及び RN 補正をして計算した誘電関数を示す。実測の誘電関数 (CRC Handbook of Chemistry 79-th Ed, CRC Press, New York 1998) を比較のため示す。

## 3 例題 2:GaAs-格子誘電率計算

### 3.1 はじめに

この節では格子誘電率の計算の仕方を説明しますが、PHASE チュートリアル の例題の内容を理解して いることを前提とします。特に振動解析の方法と ekcal の実行方法についての知識が必要です。ベリー位相計算は ekcal を用いて行います。

### 3.2 ベリー位相計算

まず、GaAs 結晶のボルン有効電荷計算を求めめるのに必要とされるベリー位相の計算を行うために、samples/lattice/GaAs/berry というディレクトリに移ります。

```
cd uvsor_v341/samples/GaAs/berry
```

ここには、ベリー位相計算の入力テンプレートが収められている template.berry とベリー位相計算の入力として与える電子密度を計算する SCF 計算の入力テンプレートが template.scf に収められています。これらのファイルは実際に使用する入力を作成する Perl スクリプト prep\_zeff.pl が参照します。まず、template.scf にある nfinput.data には通常の SCF 計算の入力と違い、原子を X,Y,Z 方向に変位させるための、記述があります。それは、atoms ブロックの次に書かれています。

```
displacement{
  sw_displace_atom = on
  displaced_atom = <ATOM_ID>
  ux = <Ux>
  uy = <Uy>
  uz = <Uz>
}
```

displaced\_atom には変位させる原子を指定し、原子の変位ベクトルがデカルト座標のベクトル (ux,uy,uz) と表すものとして、ux,uy,uz に入力します。(ただし、coordinate\_system は cartesian になっているものとします。) displaced\_atom,ux,uy,uz には <ATOM.ID>,<Ux>,<Uy>,<Uz> が指定されていますが、これらは calc\_zeff.sh が実際に使用する入力を作るときに置き換えますので、必ずこのように入力してください。

template.berry に収められている nfinput.data を見ると、ベリー位相計算を行うときに必要となるタグが見つかります。

```
Berry_phase{
  sw_berry_phase = on
  g_index = <G_INDEX>
  mesh{ n1 = <MESH_N1>, n2 = <MESH_N2>, J = <MESH_J> }
}
```

g\_index には逆格子ベクトルのインデックス (1、2、または 3) を指定します。ブロック mesh では、k 空間のメッシュを n1,n2,J で指定します。n1,n2 は scf 計算の時と同程度にします。J はそれよりも 3 倍から 5 倍大きくとります。g\_index,n1,n2,J には <G\_INDEX>,<MESH\_N1>,<MESH\_N2>,<MESH\_J> が指定されていますが、これらは prep\_zeff.pl が実際に使用する入力を作るときに置き換えますので、必ずこのように入力してください。

ディレクトリに \$HOME/uvSOR\_v341/bin ある prep\_zeff.pl を以下のように実行します。

```
$ $HOME/uvSOR_v341/bin/prep_zeff.pl 0.05 '1 2' '4 4 20' '4 4 20' '4 4 20'
```

一番目の引数が原子変位量であり、二番目の引数がボルン有効電荷を計算する原子の番号のリストです。最後の三つの引数では、'n1 n2 J' の様にメッシュパラメータ (n1,n2,J) を指定します。最初のメッシュパラメーターは一番目の逆格子ベクトルに対して適用されます。つぎは二番目、その次は三番目というように対応付けられています。上記の様に実行すると、原子変位量は 0.05 bohr になり、1 番目の原子 (Ga) と 2 番目の原子 (As) のボルン有効電荷を計算します。どの逆格子ベクトルに対しても (4,4,20) メッシュパラメーターが適用されます。この Perl スクリプトは template.scf と template.berry を参照して、実際に使用する入力を生成します。実際に使用する入力は scf\_a0,...,berry\_a0\_g1,... といったディレクトリに置かれます。これらのディレクトリで phase または ekcal を実行しなければなりません、それを行う Perl スクリプト exec\_zeff.pl が生成されていますので、それを以下のようにして実行します。

```
$ ./exec_zeff.pl "$HOME/uvSOR_v341/bin/phase" \
"$HOME/uvSOR_v341/bin/ekcal" "1"
```

このスクリプトの実行が終了すると、berry.data というファイルが生成されます。これには、ボルン有効電荷を計算するためのベリー位相のデータが収められています。これを phonon ディレクトリにコピーします。

```
$ cp berry.data ../phonon
```

### 3.3 振動解析および格子誘電率計算

次に、振動解析を行うディレクトリ phonon に移ります。

```
$ cd ../phonon
```

このディレクトリの PHASE の入力 nfinput.data には振動解析を制御する Phonon ブロックがあります。

```
Phonon{
  sw_phonon = on
  sw_calc_force = on
  displacement = 0.1
  sw_vibrational_modes = on
  point_group = Td
  sw_lattice_dielectric_tensor = off
}
```

GaAs の構造の点群は  $T_d$  であるので、point\_group にそれを指定しています。sw\_calc\_force と sw\_vibrational\_modes がともに ON になっているので、振動解析のための力計算を行い、それがすべて完了したあとに、振動解析が行われます。

SCF 計算行ったときと同じ様にして、PHASE を実行してください。

```
% mpirun -np 1 $HOME/uvSOR_v341/bin/phase
```

この計算が終わると force.data が出力されます。

先の入力で sw\_calc\_force を OFF にし、sw\_lattice\_dielectric\_tensor を ON にして、格子誘電率を計算します。berry.data を読み込み有効電荷を計算するために、下記の様に sw\_effective\_charge を ON にしなければいけません。

```
Postprocessing{
  Polarization{
    sw_bp_property = on
    property = effective_charge
  }
}
```

先ほどと同様に PHASE を実行します。

```
% mpirun -np 1 $HOME/uvSOR_v341/bin/phase
```

この計算が終わると、出力ファイル mode.data に振動解析の結果、モード有効電荷、格子誘電率が出力されます。

```
n=      6 T2  IR&R
  hbarW= 0.12314123E-02 Ha = 0.33508432E-01 eV; nu= 0.27026376E+03 cm^-1
  1  0.7197015024  0.0000000000  0.0000000000
  2 -0.6942836217  0.0000000000  0.0000000000
  Mode effective charge and its norm:
  Z= 0.3438767680  0.0000000000  0.0000000000 Norm= 0.3438767680
--- Lattice and static dielectric tensors ---
[  1.8176  0.0000  0.0000 ] [  1.8176  0.0000  0.0000 ]
[  0.0000  1.8176  0.0000 ] [  0.0000  1.8176  0.0000 ]
[  0.0000  0.0000  1.8176 ] [  0.0000  0.0000  1.8176 ]
```



振動解析だけを行ったときとは違い、各モードの振動数と固有ベクトルの次にモード有効電荷が出力されています。'Z='の次に並んでいる三つの値がモード有効電荷のデカルト座標での三成分です。'Norm='の次の値はこのベクトルの大きさです。最後の三行に格子誘電率が出力されています。左側の3x3の行列が格子誘電率です。右側にはその格子誘電率に電子誘電率を加えた行列が出力されます。この計算では、電子誘電率を入力しなかったため、電子誘電率の値はゼロになっています。格子誘電率は1.8と計算されています。

ポルン有効電荷は output001 に出力されています。

```

--- Corrected effective charges ---
      [ 2.06653  0.00000  0.00000 ]
Zeff( 1) = [ 0.00000  2.06653  0.00000 ]
      [ 0.00000  0.00000  2.06653 ]

      [ -2.06653  0.00000  0.00000 ]
Zeff( 2) = [ 0.00000 -2.06653  0.00000 ]
      [ 0.00000  0.00000 -2.06653 ]

```

'Corrected effective charges' というタイトル以下に書かれている3x3の行列がポルン有効電荷テンソルです。'Zeff'の後の括弧の中の番号は原子の番号です。Ga原子のポルン有効電荷は2.07と計算され、Asのポルン有効電荷は-2.07と計算されています。

## 4 おわりに

以上、UVSORの特徴、インストール方法、及び使用方法をSi<sub>2</sub>とGaAsの計算を例題に説明しました。UVSORは半導体・絶縁体のほか、金属の誘電関数・光学スペクトルを予測できます。金属の例として、samplesには銅(Cu)の入力例も用意してありますので、電子系誘電関数の計算をおこなってみてください。計算の仕方は基本的にSiの場合と同じです。付属のCuのポテンシャルはウルトラソフト型擬ポテンシャルですのでRN法は使用できません。ドローデ項の取り扱いについては、UVSOR ユーザマニュアルをご参照ください。