

文部科学省次世代 I T 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

PHASE TOOLS ver.1.10

ユーザマニュアル

本ソフトウェアは文部科学省次世代 I T 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

(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利用できる行為には、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場合には、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帰することとします。

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

1	はじめに	1
1.1	PHASE TOOLS とは	1
1.2	PHASE TOOLS の動作環境	1
1.3	インストール	1
2	状態密度	1
2.1	状態密度図の作成	1
2.2	dos.pl のオプション	2
3	バンド構造	4
3.1	k 点ファイルの生成	4
3.2	バンド構造図の作成	4
3.3	band.pl のオプション	5
4	構造緩和と分子動力学	6
4.1	原子運動の可視化	6
5	フォノン	7
5.1	振動数レベル図の作成	7
5.2	freq.pl のオプション	8
5.3	基準振動の固有ベクトルの可視化	9
6	PHASE 入出力ファイルを扱うためのスクリプト	9
6.1	はじめに	9
6.2	準備	10
6.3	入力データ検査	10
6.4	入力データ作成	12
6.5	データ変換	14

表 目 次

図 目 次

1	バルク Si の状態密度図.	2
2	バルク Si のバンド構造図.	5
3	バルク Si の構造最適化過程.	6
4	ブラベーセルで表したバルク Si の構造最適化過程 (step 10).	7
5	バルク Si の振動数レベル図.	8
6	バルク Si の基準振動の固有ベクトルの図.	9

1 はじめに

1.1 PHASE TOOLS とは

第一原理計算プログラムである PHASE は状態密度やエネルギーバンドデータなどを出力できます。PHASE で計算結果を確認・検証するために、それらのデータを手早く可視化するプログラムがあると便利です。また、入力データの検査を行ったり、座標データファイルから入力ファイルテンプレートを作成したり、PHASE の出力結果をほかのプログラムで利用できる形式に簡単に変換できるプログラムがあると便利です。そのような目的で開発されたいくつかのプログラムが PHASE TOOLS です。

1.2 PHASE TOOLS の動作環境

PHASE TOOLS は Perl と gnuplot がインストールされている環境で動作します。6 章で紹介するスクリプトは Python で動作するので、これらを利用する場合は Python もインストールされている必要があります。推奨する Perl と gnuplot のバージョンはそれぞれ 5.6.1 以上と 3.7 以上です。Python は、バージョン 2.3 以降が推奨されます。

Perl についてご存じない方は <http://www.perl.com> をご覧下さい。gnuplot についてご存じない方は <http://www.gnuplot.info> をご覧下さい。Python についてご存じない方は <http://www.python.org/> をご覧ください。

なお、以後説明する作業は、TOOL のインストールされているディレクトリー、tools ディレクトリー下で行うことを想定しています。サンプル用データは tools/examples 以下にあります、また、作業用ディレクトリーとして tools/work が存在することを仮定しています。

1.3 インストール

PHASE TOOLS は PHASE とともに配布されています。PHASE を展開したディレクトリの下に tools というディレクトリがあるのでそのディレクトリに移り、ディレクトリ bin にあるプログラムを実行可能にして下さい。

```
$ cd bin
$ chmod u+x *
```

さらに、作業ディレクトリを作成する事をおすすめします。

```
$ cd $HOME/phase/tools
$ mkdir work
```

以降の説明ではこのディレクトリ work があることを仮定します。これでインストール完了です。

2 状態密度

2.1 状態密度図の作成

PHASE の計算で状態密度データを出力させることが出来ます。それについては PHASE ユーザーマニュアルやチュートリアルマニュアルをご覧ください。その状態密度データ dos.data を可視化するプログラムが dos.pl です。example の dos.data を work にコピーします。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/dos.data .
```

間違いなく dos.data がコピーされていることを ls で確認してください。

```
$ ls dos.*
dos.data
```

dos.pl を用いて、この状態密度データ dos.data を可視化してみましょう。次のようにコマンドを入力して下さい。

```
$ dos.pl dos.data -erange=-13,5 -color
```

こうすると、EPS ファイル density_of_states.eps が生成されます。UNIX 環境で、これを見るには ghostview や gv などを必要とします。


```
$ ghostview density_of_states.eps
```

または

```
$ gv density_of_states.eps
```

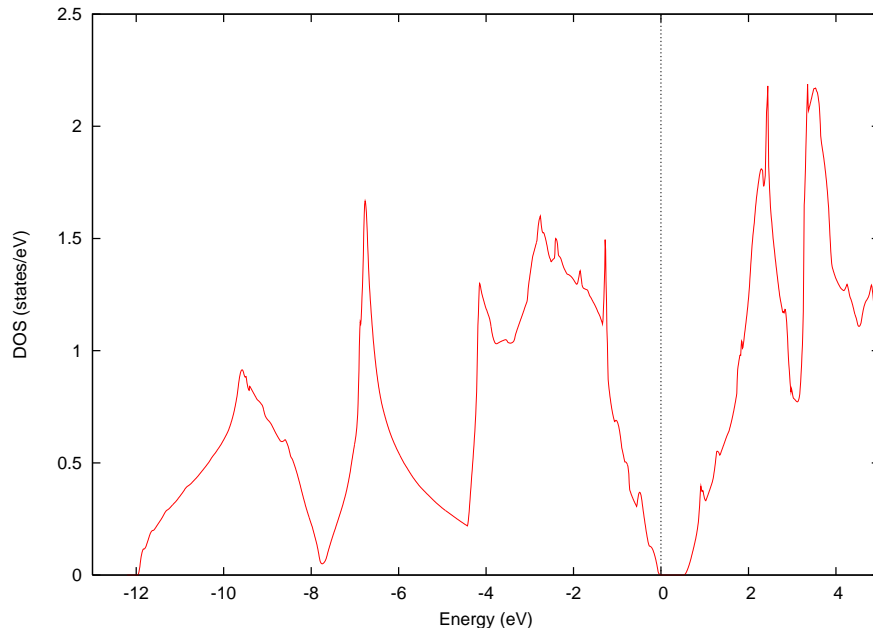


図 1: バルク Si の状態密度図.

`dos.pl` を実行するときに状態密度データ `dos.data` の後に付加した `-erange` は表示するエネルギーの範囲を制御するオプション, `-color` はカラー出力を行うためのオプションです。次節で `dos.pl` のオプションについて説明します。

2.2 `dos.pl` のオプション

なにも付加せずに `dos.pl` を実行すると利用方法が表示されます。

```
$ dos.pl
Version: 3.00
Usage: dos.pl DosData -erange=Emin,Emax -einc=dE -dosrange=DOSmin,DOSmax -dosinc=dDOS
        -title=STRING -with_fermi -width=SIZE -font=SIZE -color -mode={total|layer|atom|projected}
        -epsf={yes|no} -data={yes|no}
```

`DosData` に状態密度データが記録されたファイル (通常 `dos.data`) を指定します。その後に作図を制御するオプションを指定します。

`-erange=Emin,Emax`

表示するエネルギーの範囲を eV 単位で指定する。

たとえば, -10 eV から 5 eV まで表示したい場合は,

`-erange=-10,5`

とします。指定をしないと, データの最小値・最大値から自動的に決定されます。

`-einc=dE`

目盛りの間隔を指定する。

たとえば, 2eV 間隔に目盛りをふりたいなら,

`-einc=2`

とします。

`-dosrange=DOSmin,DOSmax`

表示する状態密度の範囲を変える。

たとえば, 0 states/eV から 12 states/eV まで表示したい場合は,

`-dosrange=0,12`

とします。

`-dosinc=dDOS`

縦軸(状態密度)の目盛りの間隔を指定する。

たとえば, 2 states/eV 間隔に目盛りをふりたいなら,

`-dosinc=2`

とします。

`-title=STRING`

グラフにタイトルを付けたいときに設定する。

たとえば, タイトルを「Total DOS」とするなら,

`-titile="Total DOS"`

とします。

`-with_fermi`

デフォルトでは描かないフェルミレベルまたは価電子帯上端のエネルギーレベルを描く。金属ではフェルミレベルを表示し, 絶縁体・半導体であれば価電子帯上端のエネルギーレベルを表示します。

`-width=SIZE`

図の幅のデフォルト値は 1 であるが, その値を変更したい場合はこのオプションを使う。たとえば, 0.8 に変更したい場合は

`-width=0.8`

とします。

`-font=SIZE`

フォントのサイズを変更したいときには, これを設定する。既定値は 14 です。

たとえば, フォントサイズを 28 にしたいならば,

`-font=28`

とします。

`-color`

グラフをカラー表示します。

`-mode={total|layer|atom}`

total を指定すると, 全状態密度図が作成されます。

layer を指定すると, 層分割の局所状態密度の図が作成されます。

atom を指定すると, 原子分割の局所状態密度の図が作成されます。

projected を指定すると, 原子軌道分割の局所状態密度の図が作成されます。

既定値は total です。

`-epsf={yes|no}`

ポストスクリプトファイルを作成しないときには, no を指定します。既定値は yes で指定がなければ, ポストスクリプトファイルが作成されます。

`-data={yes|no}`

層分割や原子分割の状態密度データから eps ファイルを作成するのではなく個別のファイルに出力するときには yes を指定します。

3 バンド構造

3.1 k 点ファイルの生成

バンド構造図を描くには、対称線に沿った k 点の列を生成し、その各 k 点での固有エネルギーを `ekcal` で計算します。`ekcal` は k 点のデータが書き込まれたファイル `kpoint.data` を読み込み各 k 点での固有エネルギーを計算します。その k 点のファイルの生成を支援するプログラムが `band_kpoint.pl` です。`band_kpoint.pl` の入力ファイルの記述形式は以下の様になっています。

```
dkv
b1x b2x b3x
b1y b2y b3y
b1z b2z b3z
n1 n2 n3 nd # Symbol
...
```

`dkv` が k 点の間隔、`b1x,b1y,b1z` は逆格子ベクトル \mathbf{b}_1 の x,y,z 成分。逆格子ベクトル $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ についても同様です。五行目以降に特殊 k 点とそのシンボルの指定をします。シンボルの指定は必須ではありませんが、指定がある場合、バンド構造図作成の際に利用されます。整数 n_1, n_2, n_3, n_d を用いて k ベクトルを

$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{n_d} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{n_d} \mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{n_d} \mathbf{b}_3$$

のように指定します。シンボルは#の後に書いてください。面心立方格子の場合の例を示します。

```
0.02 <---- k 点の間隔
-1.0 1.0 1.0
1.0 -1.0 1.0 <---- 逆格子ベクトル
1.0 1.0 -1.0
0 1 1 2 # X <---- n1 n2 n3 nd # Symbol
0 0 0 1 # {/Symbol G}
1 1 1 2 # L
5 2 5 8 # U
1 0 1 2 # X
```

これと同じものがディレクトリ `example` にあるので、それをコピーして `band_kpoint.pl` を実行してみましょう。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/bandkpt_fcc_xglux.in .
$ band_kpoint.pl bandkpt_fcc_xglux.in > output
```

こうすると `kpoint.data` が生成されます。これがバンド構造計算用の k 点のファイルです。この k 点のファイルを入力に加えて、`ekcal` で k 点での固有エネルギーを計算してください。`ekcal` の実行の仕方については PHASE ユーザーマニュアルおよびチュートリアルマニュアルをご覧ください。

3.2 バンド構造図の作成

`band.pl` でバンド構造図を描くことができます。PHASE の `ekcal` の出力 `nfenergy.data` と `band_kpoint.pl` の入力ファイルが `band.pl` の入力になります。前節の入力例で生成した `kpoint.data` を入力とし、`ekcal` で固有エネルギー計算を行い、結果得られた固有エネルギーファイル `nfenergy.data` がディレクトリ `example` にあります。このファイルを使ってバンド構造図を描いてみましょう。`example` にある `nfenergy.data` と `bandkpt_fcc_xglux.in` を `work` にコピーし、それらを入力として `band.pl` を実行します。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/nfenergy.data .
$ cp ../example/bandkpt_fcc_xglux.in .
$ band.pl nfenergy.data bandkpt_fcc_xglux.in -erange=-13,5 -color
```

こうすると、EPS ファイル `band_structure.eps` が生成されます。このファイルをご覧になるには、`ghostview` や `gv` などのソフトウェアが必要です。

```
$ ghostview band_structure.eps
```

または

```
$ gv band_structure.eps
```

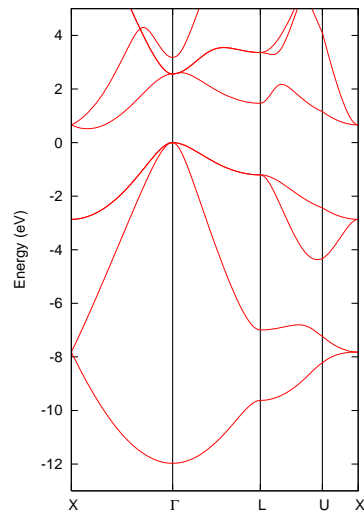


図 2: バルク Si のバンド構造図。

`band.pl` を実行するときに付加した `-erange` は表示するエネルギーの範囲を制御するオプション, `-color` はカラー出力を行うオプションです。次節で `band.pl` のオプションについて説明します。

3.3 `band.pl` のオプション

なにも付加せずに `band.pl` を実行すると利用方法が表示されます。

```
$ band.pl
Usage: band.pl EnergyDataFile KpointFile -erange=Emin,Emax
-einc=dE -ptype={solid_circles|lines} -with_fermi
-width=SIZE -color
```

`KpointFile` の後が作図を制御するオプションです。

```
-erange=Emin,Emax
```

表示するエネルギーの範囲を eV 単位で指定する。

たとえば, -10 eV から 5 eV まで表示したい場合は,

```
-erange=-10,5
```

とします。

```
-einc=dE
```

目盛りの間隔を指定する。

たとえば 2eV 間隔に目盛りをふりたいなら,

```
-einc=2
```

とします。

```
-ptype=TYPE
```

描画種を選択する。

`-ptype=solid_circles` : 黒く塗りつぶされた円で表示する。

`-ptype=lines` : 直線でつなぐ (デフォルト)。

-with_fermi

デフォルトでは描かないフェルミレベルまたは価電子帯上端のエネルギーレベルを描く。金属ではフェルミレベルを表示し、絶縁体・半導体であれば価電子帯上端のエネルギーレベルを表示します。

-width=SIZE

図の幅のデフォルト値は 0.5 であるが、その値を変更したい場合はこのオプションを使う。たとえば、0.3 に変更したい場合は

-width=0.3

とします。

-color

グラフをカラー表示する。

4 構造緩和と分子動力学

4.1 原子運動の可視化

構造最適化過程や分子動力学計算で得られた原子運動を BioStationViewer で見ることができます。Version 5 以降の BioStationViewer は拡張 trajectory 形式のファイル (*.tr2) をサポートします。構造最適化過程のデータ (nfdym.data) を拡張 trajectory 形式に変換する Perl スクリプトが dnm2tr2.pl です。FCC のプリミティブセルに Si が二原子入った非平衡状態を初期構造とし、構造最適化した結果 nfdym_Si2_relax.data が sample ディレクトリにあります。これを拡張 trajectory 形式に変換するには以下のようにします。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/nfdym_Si2_relax.data .
$ dnm2tr2.pl nfdym_Si2_relax.data
```

このようにすると、dym.tr2 というファイルと grid.mol2 というファイルが生成されます。前者は原子の座標などが記述されたファイルであり、後者は対応するセルの情報などが記述されたファイルです。これらのファイルを BioStationViewer で読み込み表示すると、図 3 のようになります。図 3 の矢印は原子に作用する力を表していま

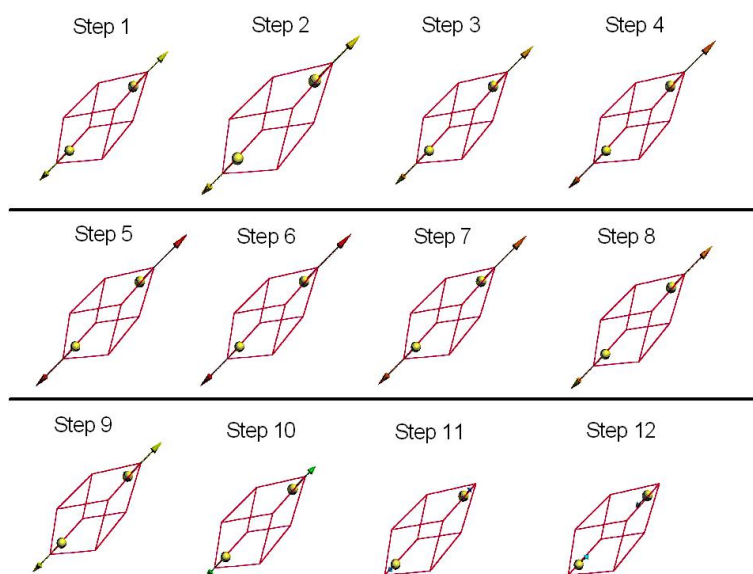


図 3: バルク Si の構造最適化過程。

す。力が極大になったあとは、原子座標の更新が進む毎に原子に作用する力が小さくなり、原子構造が最適化されていく様子が分かります。図3ではプリミティブセルで表示されますが、以下のような control.inp というファイルを作成すれば、原点の移動やセルの変更ができます。

```
origin 1.2825 1.2825 1.2825
vector1 10.26 0 0
vector2 0 10.26 0
vector3 0 0 10.26
```

この control.inp を使用して dynm2tr2.pl で dynm.tr2 を作成すると原点が (1.2825,1.2825,1.2825) bohr に移り、セルのベクトルが (10.26,0,0), (0,10.26,0), (0,0,10.26) bohr になります。以下のようにして、dynm.tr2 を作成します。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/nfdynm_Si2_relax.data .
$ dynm2tr2.pl nfdynm_Si2_relax.data control.inp
```

ブラベーセルで構造最適化過程の step 10 を図示したのが、図4です。

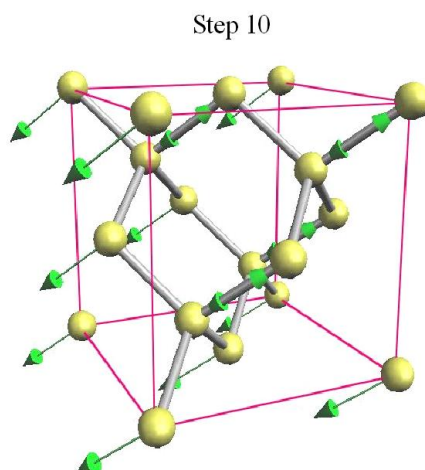


図4: ブラベーセルで表したバルク Si の構造最適化過程 (step 10)。

5 フォノン

5.1 振動数レベル図の作成

PHASE の振動解析機能を使用すると、結晶の基準振動モードの振動数と固有ベクトルが得られます。それらのデータは PHASE の出力ファイル mode.data に出力されます。Perl スクリプト freq.pl は、mode.data から振動数のデータを取り出し振動数レベル図を作成します。バルク Si の振動数解析結果 mode_Si2.data が sample ディレクトリにあります。以下のようにすれば、バルク Si の振動数のレベル図を作成できます。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/mode_Si2.data .
$ freq.pl mode_Si2.data
```

こうすると、EPS ファイル freq.eps が生成されます。このファイルをご覧になるには、ghostview や gv などのソフトウェアが必要です。

```
$ ghostview density_of_states.eps
```

または

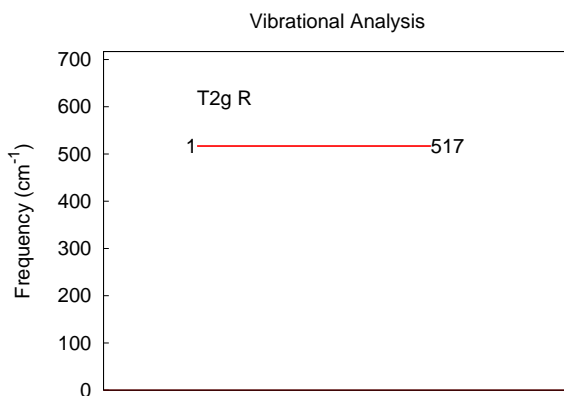


図 5: バルク Si の振動数レベル図。

```
$ gv density_of_states.eps
```

などのコマンドを実行すると、図 5 のような振動数レベルの図が得られます。

振動数レベルを表す横棒は既約表現ごとに列にまとめて分類され、その各列の上には既約表現の名称と活性を表す記号 (IR,R,IR&R,NON) が表示されます。IR は赤外活性を表し、R はラマン活性を表します。IR&R は赤外活性とラマン活性があることを示します。NON はサイレントモードであることを示しています。作成された振動数レベル図では、横線の右側には振動数が cm^{-1} 単位で表示されます。既約表現ごとに振動数の低い順に番号付けされ、横線の左側に表示されます。

5.2 freq.pl のオプション

なにも付加せずに freq.pl を実行すると利用方法が表示されます。

```
$ freq.pl
*** A visualization program for vibrational frequencies ***
Usage: freq.pl [-width=W] [-height=H] [-nrep=N] {-solid|-mol|-ignored_modes=LIST} mode.data
```

mode.data の前が作図を制御するオプションです。

-width=W

図の幅のデフォルト値は 1 であるが、その値を変更したい場合はこのオプションを使う。

たとえば、0.3 に変更したい場合は

-width=0.3

とします。

-height=H

図の幅のデフォルト値は 1 であるが、その値を変更したい場合はこのオプションを使う。

たとえば、2.5 に変更したい場合は

-height=2.5

とします。

-nrep=N

一つの図に表示する既約表現の数。振動モードの既約表現がこの数よりも多いときには、複数の EPS ファイルが作成されます。

-solid

固体の場合に並進を非表示にするオプション。

これはデフォルトで設定されています。

-mol

分子の場合に回転と並進を非表示にするオプション。

```
-ignored_modes=LIST
```

LIST のところにコンマで区切って並べた番号のモードは表示されなくなります。

たとえば、

```
-ignored_modes=1,2,3
```

とすると 1,2,3 番のモードは表示されなくなります。

5.3 基準振動の固有ベクトルの可視化

BioStationViewer を使用すると基準振動の固有ベクトルを可視化することができます。Perl スクリプト `animate.pl` は、`mode.data` に書き込まれている振動モードの固有ベクトルのデータを読み込み、基準振動の軌跡を拡張 trajectory 形式ファイルに変換します。バルク Si の振動解析の結果 `mode_Si2.data` が sample ディレクトリーにあります。バルク Si の基準振動モードを可視化するには以下のようにして、各振動モードごとに拡張 trajectory 形式ファイルを作成します。

```
$ cd PHASE_INST_DIR/samples/tools/work
$ cp ../example/mode_Si2.data .
$ animate.pl mode_Si2.data control.inp
```

`dynam2tr2.pl` と同じで、`control.inp` というファイルで原点の移動とセルベクトルの変更ができます。ブラベセルで表示するために、`control.inp` には

```
origin 1.27189 1.27189 1.27189
vector1 10.17512 0 0
vector2 0 10.17512 0
vector3 0 0 10.17512
```

と記述して、原点を (1.27189, 1.27189, 1.27189) bohr に移し、セルベクトルを (10.17512, 0, 0), (0, 10.17512, 0), (0, 0, 10.17512) bohr に変更します。このようにすると、`mode_1.tr2`, `mode_2.tr2`, ..., `mode_6.tr2` というファイルと `grid.mol2` というファイルが作成されます。拡張 trajectory 形式のファイルは振動モードの数だけ出力されます。たとえば `mode_6.tr2` と `grid.mol2` を BioStationViewer で読み込むと、6 番目の基準振動の固有ベクトルを矢印として見るすることができます。図 6 にそれを示します。

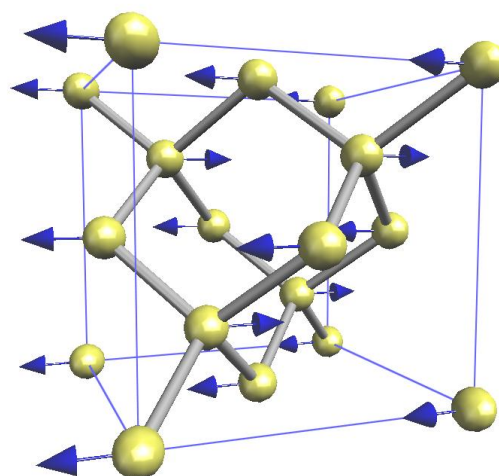


図 6: バルク Si の基準振動の固有ベクトルの図。

6 PHASE 入出力ファイルを扱うためのスクリプト

6.1 はじめに

PHASE TOOLS には、入出力ファイルを扱うための便利なスクリプトが同梱されています。ここでは、このようなプログラムについて説明します。以下のスクリプトがあります。

inpcheck.py 入力データの整合性をチェックし、不整合のある場合はユーザーに注意を喚起する・修正案を提示するスクリプト

geninp.py PHASE による構造最適化の結果や PHASE 以外の電子状態計算プログラムの入力を、PHASE の入力に変換するスクリプト

conv.py PHASE の出力をほかの可視化ソフトウェアでも可視化できるように変換を施すスクリプト

すべてのスクリプトは対話的にもバッチ処理的にも利用できるように設計されており、簡便で統一的な手続きによって利用することが可能となっています。バッチ処理的に利用する場合、すべてのオプションを引数で指定する必要があります。'-h' オプションをつけてスクリプトを実行すると、利用できる引数の情報を得ることが可能です。

6.2 準備

本章のスクリプトを利用する場合に必要な準備を説明します。

- 本章で紹介するスクリプトはすべて Python スクリプトです。したがって、お使いの環境に Python がインストールされている必要があります。Python は、配布元 (<http://www.python.org/>) から無償で入手することができます (Linux の場合、通常プリインストールされています)。
- スクリプトは、tools ディレクトリー下に置かれています。このディレクトリーを環境変数 PATH に加えておくことが推奨されます。
- 擬ポテンシャルファイルが格納されたディレクトリーの設定を行います。ホームディレクトリー/`.piou` ファイル (Windows の場合ユーザープロファイルフォルダー \`.piou`) ファイルに、以下の内容を記述します。

```
pp.default_pp_dir = /home/foo/pp
```

ここで `/home/foo/pp` が PHASE の擬ポテンシャルファイルを格納したディレクトリーです。また、VASP の入力ファイルを扱う場合、以下の記述行ってください。

```
pp.vasp_pp_dir = /home/foo/VASP/potpw_GGA
```

ここで `/home/foo/VASP/potpw_GGA` が VASP の擬ポテンシャルファイルが格納されたディレクトリーです。

6.3 入力データ検査

入力データチェック機能は、`inpcheck.py` スクリプトによって実現できます。`inpcheck.py` は、PHASE の入力データの内容を検査し、その妥当性や可能な場合の修正案を提示するスクリプトです。利用方法は、PHASE の入力ファイルの存在するディレクトリーにおいて以下のコマンドを発行するのみです。

```
% inpcheck.py
```

`-r` オプションをつけると、作業ディレクトリー下のすべてのサブディレクトリーを再帰的に検査します。`inpcheck.py` によって様々な入力データチェックが行われ、その結果が標準エラー出力に出力されます。たとえば、以下のような出力が得られます。

```
input data validator utility for PHASE
Copyright (C) the RISS project, The University of Tokyo
INFO: -- running the input validator --
INFO: specfile : phase.spec
INFO: checking directory : /s0/home2/jkoga/chase3pt-projects/ScrapBook/nara/LiFePO4/INPUT_wU/AF/omfix/omfix2
INFO: validating input...
INFO:
INFO: checking if required/recommended entries exist...
INFO:
INFO: found [postprocessing.charge.filetype] at line 171, a recommended entry when [postprocessing.charge.sw_charge_rspace] is 'on'
INFO: found [accuracy.initial_wavefunctions] at line 53, a recommended entry when [accuracy.hubbard.sw_hubbard] is 'on'
INFO: found [accuracy.hubbard.projectors.table] at line 30, a required entry when [accuracy.hubbard.sw_hubbard] is 'on'
INFO: found [wavefunction_solver.solvers.table] at line 122, a recommended entry.
INFO: found [accuracy.cutoff_cd] at line 9, a required entry.
INFO: found [accuracy.cutoff_wf] at line 8, a required entry.
INFO: found [structure.atom_list.atoms.table] at line 77, a recommended entry.
INFO: found [printlevel.base] at line 177, a recommended entry.
INFO: found [accuracy.ksampling.mesh] at line 15, a recommended entry when [accuracy.ksampling.method] is 'monk' and [accuracy.ksampling.mp_index] is 'undefined'
INFO: found [charge_mixing.mixing_methods.table] at line 140, a recommended entry when [control.condition] is 'continuation'
INFO: found [structure.unit_cell] at line 59, a required entry.
INFO: found [accuracy.scf.convergence.delta_total_energy] at line 44, a recommended entry when [control.condition] is 'continuation'
INFO: found [accuracy.num_bands] at line 11, a required entry.
INFO: found [accuracy.projector_list.projectors.table] at line 37, a required entry when [accuracy.hubbard.sw_hubbard] is 'on'
INFO: found [structure.element_list.table] at line 110, a required entry.
INFO:
INFO: checking whether each entries are valid...
INFO:
INFO: line 2: entry [control.condition] matches the specification.
INFO: line 3: entry [control.cpumax] matches the specification.
INFO: line 4: entry [control.max_iteration] matches the specification.
INFO: line 8: entry [accuracy.cutoff_wf] matches the specification.
INFO: line 9: entry [accuracy.cutoff_cd] matches the specification.
INFO: line 11: entry [accuracy.num_bands] matches the specification.
INFO: line 14: entry [accuracy.ksampling.method] matches the specification.
INFO: line 15: entry [accuracy.ksampling.mesh.nx] matches the specification.
INFO: line 15: entry [accuracy.ksampling.mesh.ny] matches the specification.
INFO: line 15: entry [accuracy.ksampling.mesh.nz] matches the specification.
INFO: line 20: entry [accuracy.smeearing.width] matches the specification.
INFO: line 22: entry [accuracy.xctype] matches the specification.
INFO: line 24: entry [accuracy.hubbard.sw_hubbard] matches the specification.
WARNING: line 25: could not find [accuracy.hubbard.sw_force_simple_mixing] in specification.
WARNING: no candidate entries
WARNING:
WARNING:
WARNING: line 27: could not find [accuracy.hubbard.occ_mix_period] in specification.
WARNING: no candidate entries
WARNING:
INFO: line 30: entry [accuracy.hubbard.projectors.table] matches the specification.
INFO: line 37: entry [accuracy.projector_list.projectors.table] matches the specification.
INFO: line 44: entry [accuracy.scf.convergence.delta_total_energy] matches the specification.
INFO: line 45: entry [accuracy.scf.convergence.succession] matches the specification.
INFO: line 49: entry [accuracy.force_convergence.max_force] matches the specification.
INFO: line 53: entry [accuracy.initial_wavefunctions] matches the specification.
INFO: line 54: entry [accuracy.initial_charge_density] matches the specification.
INFO: line 58: entry [structure.unit_cell.type] matches the specification.
INFO: line 61: entry [structure.unit_cell.a] matches the specification.
INFO: line 62: entry [structure.unit_cell.b] matches the specification.
INFO: line 63: entry [structure.unit_cell.c] matches the specification.
```

```

INFO: line 64: entry [structure.unit_cell.alpha] matches the specification.
INFO: line 65: entry [structure.unit_cell.beta] matches the specification.
INFO: line 66: entry [structure.unit_cell.gamma] matches the specification.
INFO: line 69: entry [structure.symmetry.method] matches the specification.
INFO: line 73: entry [structure.magnetic_state] matches the specification.
INFO: line 75: entry [structure.atom_list.coordinate_system] matches the specification.
INFO: line 77: entry [structure.atom_list.atoms.table] matches the specification.
INFO: line 110: entry [structure.element_list.table] matches the specification.
INFO: line 122: entry [wavefunction_solver.solvers.table] matches the specification.
INFO: line 128: entry [wavefunction_solver.submat.before_renewal] matches the specification.
INFO: line 131: entry [wavefunction_solver.rmm.edelta_change_to_rmm] matches the specification.
INFO: line 136: entry [charge_mixing.sw_recomposing] matches the specification.
INFO: line 137: entry [charge_mixing.spin_density_mixfactor] matches the specification.
WARNING: line 138: could not find [charge_mixing.occ_matrix_mixfactor] in specification.
WARNING: no candidate entries
WARNING:
INFO: line 140: entry [charge_mixing.mixing_methods.table] matches the specification.
ERROR: could not find bfgs in choice.
ERROR: no candidate choice
ERROR: line 148: entry [structure.evolution.method] does not match the specification.
ERROR:
INFO: line 150: entry [structure.evolution.gdiis.initial_method] matches the specification.
INFO: line 151: entry [structure.evolution.gdiis.c_forc2gdiis] matches the specification.
INFO: line 153: entry [structure.evolution.dft] matches the specification.
INFO: line 158: entry [postprocessing.dos.sw_dos] matches the specification.
INFO: line 159: entry [postprocessing.dos.method] matches the specification.
INFO: line 170: entry [postprocessing.charge.sw_charge_rspace] matches the specification.
INFO: line 171: entry [postprocessing.charge.filetype] matches the specification.
INFO: line 172: entry [postprocessing.charge.title] matches the specification.
INFO: line 177: entry [printlevel.base] matches the specification.
INFO: line 178: entry [printlevel.inputfile] matches the specification.
INFO:
INFO: input validation done.
INFO:
ERROR: found 1 errors and 3 warnings in /s0/home2/jkoga/chase3pt-projects/ScrapBook/LiFeP04/INPUT_wU/AF/omfix/omfix2
ERROR: check the log for details.

```

inpcheck.py は、下記のようなチェックを実行します。

- タグのスペルチェック、可能な場合候補の提示。
- 変数の型をチェック。
- 有限の数の選択肢を指定するタイプの変数の場合、妥当な選択肢であるかどうかをチェック。可能な場合候補の提示。
- 可能な場合、変数の範囲のチェック。
- 必要に応じてファイルの存在のチェック（例：継続計算の場合継続に必要なファイルが揃っているかチェック）。
- 必須ないし推奨の設定がなされているかチェック。条件に応じた判定も対応（例：DFT+U を利用する場合プロジェクトの定義は必須だがそうでなければ不要）。
- 制限のある変数の妥当性チェック（例：単位胞を基本格子で指定している場合、単位胞は格子定数では指定できない）。
- 表形式データの場合、必要な属性値が定義されているか否かチェック。
- 表形式データの場合の各属性値の妥当性のチェック。
- 以上は統一的な検査；さらに以下のような（統一的に扱うのは困難な）個別の検査も行う。
 - － バンド数の妥当性のチェック。
 - － k 点サンプリングの妥当性のチェック。
 - － カットオフエネルギーの妥当性のチェック。
 - － 四面体法による状態密度計算が正しく設定されているか否かのチェック。
 - － 分子動力学シミュレーションの場合の各元素の質量・時間刻み・熱浴の質量などの妥当性のチェック。
 - － 計算機能に応じた収束判定の妥当性のチェック（例：分子動力学シミュレーションは比較的厳しい収束判定を採用することが望ましい）。
 - － 反転対称性の検査（反転対称性がないにも関わらずあると指定するとエラー）。
 - － ボンド長の検査。
 - － 波動関数ソルバー・電荷密度混合法のチェック（例：Davidson 法は前処理を無効にしないと正しく動作しない）。
 - － その他。

6.4 入力データ作成

座標データを入力とし，ユーザー指定の方針に従い PHASE でそのまま実行できる入力ファイルを生成するスクリプトが `geninp.py` です。対話的にもバッチ处理的にも利用することができます。ここでは，対話的に利用する方法を説明します。

まず，以下のコマンドを実行します。

```
% geninp.py
```

すると，以下のように原子配置の種類を指定する指示が表示されます。

```
select the type of the atomic coordinate file
0. phase_input
1. phase_output
2. VASP_input
3. VASP_output
4. OpenMX_input
5. OpenMX_output
6. XSF
7. xyz
8. cube
9. cif
10. dmol
11. OpenBabel_interface
x. Exit
Please enter a selection (0/1/2/3/4/5/6/7/8/9/10/11/x) [0]:
```

対応する座標データ形式は，以下の通りです。

- PHASE 入力
- PHASE 出力
- VASP 入力
- VASP 出力
- OpenMX 入力
- OpenMX 出力
- XSF 形式
- xyz 形式
- cube 形式
- cif 形式 (ただし対称性は考慮しません)
- dmol 形式

さらに，OpenBabel(http://openbabel.org/wiki/Main_Page) のインターフェースを備えています。OpenBabel がインストールされており，パスが適切に設定されていれば利用することができます。OpenBabel インターフェースによって，OpenBabel が理解することのできる 100 以上の座標データフォーマットを扱うことが可能となっています。ただし伝統的に化学の分野で利用されているものなので，ほとんどのフォーマットは単位胞という概念を持たず，PHASE の入力のもとにするには不十分な場合も多い点にご留意ください。

ここで座標データ形式を選択すると，次が表示されます。

```
Please enter the name the atomic coordinate file, or type x to exit.[...]
```

(... の部分には，種類に応じたデフォルトの座標データファイル名が出力されます) ここでは，座標データファイルのファイル名を指定します。環境によってはタブ補間が利用できます。適切なファイル名を入力すると，次が得られます。

Please enter the frame no. (the last frame will be adopted if a negative value is specified), or type x to exit.

ここでは、複数の原子配置データを保持する座標データファイル出会った場合にどの座標データを使用するかを指定します。0 始まりの整数で利用したい原子配置の数値を指定します。あるいは、負の値を指定します。負の値を指定すると、一番最後に定義された原子配置データが採用されます。構造最適化を実施したあとの座標データを利用したい場合などには、負の値を指定するとよいでしょう。

利用する原子配置を指定すると、次が得られます。

- 0. static
- 1. stropt
- 2. phonon
- 3. dos
- 4. md_nvt
- 5. md_nve
- 6. neb
- a. apply the default settings here after
- x. Exit

Please enter a selection (0/1/2/3/4/5/6/a/x) [1]:

ここでは、どのような計算を実行するかを指定します。なお、この項目以降 "a" を指定すると以後デフォルト値が採用され、そのまま入力データ作成フェーズへ移行します。また、いつでも "x" を入力することによってこのプログラムを終了させることもできます。

ここでは、以下を選択することができます。

- 0. static 1 点の SCF 計算を実行します。
- 1. stropt 構造最適化を実行します。
- 2. phonon 点での振動解析を実行します。
- 3. dos 状態密度計算に適した入力を作成してくれます。
- 4. md_nvt 温度一定の分子動力学シミュレーションを実行します。時間刻みや質量、熱浴パラメーターなどはプログラムによって自動的に解決されます。
- 5. md_nve エネルギー一定の分子動力学シミュレーションを実行します。時間刻みや質量などはプログラムによって自動的に解決されます。
- 6. neb Nudged elastic band 法による計算を行います。この項目を選択した場合、さらに始状態と終状態の原子配置も同じように聞かれます。

実行する計算のタイプを選んだあとは、出力ディレクトリーを指定します。

Please enter the name of the output directory, or type x to exit. [stropt]:

デフォルト値は、計算の種類によって変わります。

次に対称性を考慮するかどうかを選びます。

take symmetry into account?

- 0. yes
- 1. no
- a. apply the default settings here after
- x. Exit

Please enter a selection (0/1/a/x) [0]:

0 を選ぶと対称性は考慮され、1 を選ぶと考慮されません。

次にスピンを考慮するかどうかを選択します。

take spin into account?

- 0. yes
- 1. no
- a. apply the default settings here after
- x. Exit

Please enter a selection (0/1/2/a/x) [1]:

0 を入力した場合スピンは考慮され、1 を選んだ場合考慮されません。
次に計算精度を選択します。

```
select the accuracy of the calculation.
0. low
1. normal
2. high
a. apply the default settings here after
x. Exit
Please enter a selection (0/1/a/x) [1]:
```

0 を選ぶと低精度、1 を選ぶと通常の精度、2 を選ぶと高精度の計算を実行する入力ファイルが得られます。
次に波動関数ソルバーおよび電荷密度混合法の設定方針を選びます。

```
select how aggressive the solvers and charge-mixing should be configured.
0. very_conservative
1. conservative
2. normal
3. aggressive
4. very_aggressive
x. Exit
Please enter a selection (0/1/2/3/4/x) [3]:
```

0 から 4 まで選択可能で、数値が大きいほどよりアグレッシブな設定となります。通常、3 程度が推奨されます。
ここまで入力すると、原子配置データを読み込み、指定のディレクトリーへ PHASE の入力データが出力されます。そのディレクトリーへ移行し、

```
% mpirun -n N phase &
```

などとすれば PHASE による計算を簡単に実行することが可能です。

6.5 データ変換

PHASE の入出力データと他のプログラムの入出力データとの間を相互変換するスクリプトが `conv.py` スクリプトです。対話的にもバッチ処理的にも利用することができます。ここでは、対話的に利用する方法を説明します。
まず、以下のコマンドを実行します。

```
% conv.py
```

その後、6.4 で説明した方法と同様の方法で、入力の原子配置の種類とそのファイル名、必要に応じてフレーム番号を指定します。さらに、出力先の種類、ファイル名も同じように指定します。フレーム番号を入力する部分では、負の値を指定すると可能な場合全フレームを出力する設定となります。また、以下の形式で細かくフレームを指定することも可能です。

```
istart,iend,gap
```

ここで `istart` は初めのフレーム、`iend` が終了フレーム、`gap` が何回に一回取り込むか、という指定となります。