

ABINITによるphonon周波数の計算

河野 輝, 2. 12. 2019

以下にABINITによるphonon周波数の計算について、daedalusで実行する前提で説明する。

1.作業ディレクトリの取得

LiTaO3用プログラム等が入った作業ディレクトリwork（NASの河野フォルダのabinitio-masterにある）を適当な場所にコピーする。

河野のgithubが生きている限り、以下のコマンドでも取得できる。

```
wget --no-check-certificate https://github.com/AKawanoku/abinitio/archive/master.tar.gz
```

```
tar -zxvf master.tar.gz
```

```
cd abinitio-master
```

ここにworkがある。

2.構造・物質データの取得

第一原理計算には、物質の構造データおよびPseudopotentialの二つのデータが必要となる。

2.1 構造データ

先ほど作成したworkディレクトリ内のmakeInputディレクトリに移動。

```
cd work
```

```
cd makeInput
```

構造データは.cif形式のファイルを取得する。例えば、<https://materialsproject.org/>などのサイトから取得できる。VESTAを自分のPCにインストールすれば.cifファイルを可視化することができる。

自分の対象の物質の.cifファイルをmakeInputディレクトリ内に置く。LiTaO3の場合はすでにLiTaO3.cifがすでに入っている。

cifファイルを参考に自分で入力ファイルを作成しても良いが、cifファイルを第一原理計算用入力ファイルに変換するプログラムcif2cellを用いる。

.cifをAbinit用入力ファイル.inに変換するコマンドはcif2cell -p abinit filename.cifである。

LiTaO3の場合は次のように実行する。

```
cif2cell -p abinit LiTaO3.cif
```

LiTaO3.inが生成される。

2.2Pseudopotential

Pseudopotentialについてはネットに多くの情報がある。一言で言うと、原子核近傍の内核電子を価電子に対するポテンシャル関数で表したもの。各原子に対してデータを準備する必要があり、Abinit用のPseudopotentialは、<https://www.abinit.org/psp-tables> から取得できる。

Pseudopotentialは色々な種類があるようだが、初めはNorm-Conservingのものをを使うことを勧める。

Pseudopotentialファイルはwork/Psps_for_testsディレクトリ内に入れる。LiTaO3の場合はLi, Ta, OのPseudopotentialがすでに入っている。

3.構造最適化

構造最適化をしなくてもphononの計算は可能。論文等では構造最適化をあらかじめするのが普通のようなのである。

LiTaO3の構造最適化用プログラムがwork/LiTaO3/optimizeディレクトリにある。optimizeディレクトリへ移動し以下のコマンドで構造最適化の計算が始まる。計算が終わるまで待つ。

```
mpirun -n 10 abinit < optimize.files > optimize.out &
```

10のところはコア(プロセス)並列の数を指定している。10以外の数も指定できるが、daedalusのCPUは12コア24スレッドなので、12より大きい値は指定できない。10コア並列でcpu稼働率が40パーセントほどになる。エラーの原因が出力されないまま計算が止まってしまう場合は、並列数を10より下げた方が良いかもしれない。

結果はoptimize.outに出力される。収束するまで何回か計算した結果が出力されているが、最後の出力にある cartesian forces (eV/Angstrom) at end:のfmaxがE-04以下のオーダーであればうまくいっている。また、length scales, Anglesの出力を格子定数のリファレンスと比較できる。

最後の== END DATASET(S) ==の中から、phonon計算用にacell, rprim, xred（最適化後の構造データ）の値をメモしておく。

LiTaO3以外の物質の計算をする場合、optimize.inおよびoptimize.filesの二つのファイルを書き換える。

optimize.inについては、optimize.in中の#-----で囲まれている物質パラメータを変更する。これらの物質パラメータは2.1節でwork/makeInputフォルダに作成した.inファイルの中からコピーすれば良い。その他のパラメータは計算精度等に関わるパラメータなので計算値の収束を確かめる段階までは変更しなくて良い。

optimize.filesは最後のPseudopotentialファイルの指定の箇所だけ変更する。自分が使用するPseudopotentialファイルに変更する。ここで、Pseudopotentialファイルの順番は、optimize.in中、znuclで設定した原子の順番と一致させておかないとエラーとなるので注意。

4.phonon周波数の計算

4.1 Γ 点($q=0$)phonon周波数

LiTaO₃のphonon周波数計算用プログラムがwork/LiTaO₃/phononディレクトリにある。phononディレクトリへ移動し次のコマンドで周波数計算が始まる。

```
mpirun -n 10 abinit < phonon.files > phonon.out &
```

結果はphonon.outに出力される。Phonon wavevector (reduced coordinates) : 0.00000 0.00000 0.00000 という記述の下に Γ 点phononのエネルギーと周波数の結果がある。

LiTaO₃以外の物質の計算をする場合、phonon.inおよびphonon.filesの二つのファイルを書き換える。

phonon.inについては、phonon.in中の#-----で囲まれている物質パラメータを変更する。これらの物質パラメータは2.1節でwork/makeInputフォルダに作成した.inファイルの中からコピーすれば良い。構造最適化をした場合は、acell, rprim, xredは最適化した結果を記入する。

phonon.filesは最後のPseudopotentialファイルの指定の箇所だけ変更する。自分が使用するPseudopotentialファイルに変更する。ここで、Pseudopotentialファイルの順番は、phonon.in中、znuclで設定した原子の順番と一致させておかないとエラーとなるので注意。

4.2 phononの対称性（モード）

LiTaO₃のphononのモードを得るには以下を実行する。

```
anaddb < phonon5.files > phonon5.log
```

phonon5.outの中の、Analysis of degeneracies and characters 以下にモードの従う既約表現の指標が書いてある。# の後ろに書かれてある数字とフォノン周波数が出力される順番が対応していると思われる。

また、各q点のフォノン周波数の出力の後に、Eigendisplacementsという記述の後、各モードの固有変位が出力されている。これらから原子変位の情報が得られる。固有変位の可視化は以下を実行すれば良い。ただし元の.cifファイルをVESTAで開いて.vestaファイルを作成し、phononディレクトリに.vestaファイルを置いておく必要がある。

```
python phononVisualiser.py
```

上記のスクリプトは自作なので、出力された結果は確認が必要。

参考文献

- ・ ABINITチュートリアル(<https://docs.abinit.org/tutorial/>)

英語だが丁寧に書かれていてわかりやすい。所々論文も参照されている。Four Basic Tutorials, DFPT1, DFPT2はやった方がよい。チュートリアル用のプログラムはabinitパッケージに入っている。abinitパッケージは<https://www.abinit.org/>からダウンロードできる。

- ・ ABINIT変数の説明(<https://docs.abinit.org/variables/#A>)

検索することでAbinitの全ての変数の説明が読める。

- ・ “密度汎関数理論入門 理論とその応用”佐々木泰造・末原 茂 共訳（吉岡書店）

理論と実際の計算法をバランスよく説明してある。研究室にある。原著ならネットに落ちていた。

- ・ “Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory”
Stefano Baroni, Stefano de Gironcoli, and Andrea Dal Corso (REVIEWS OF MODERN
PHYSICS, VOLUME 73, APRIL 2001)

フォノンの第一原理計算およびLO - TO splitting の理論が書かれてある。