

## 1 PHONOPY の概要

phonopy は直接法によってフォノンの DOS や分散を計算することができる。この計算のためにはまずは SCF 計算が必要で、ここではその計算を QE でやる場合の説明をする。

## 2 スーパーセルを作る

まず、phonopy では基本単位を与えさえすれば、指定したサイズの supercell を作ってくれる。ここでは例として Si の例で考えてみよう。まず、普通の Si の input を用意する。ただしいくつか注意がある。

1. ibrav=0 のみが許される。
2. ATOMICPOSITIONS は crystal 座標 ( $a_1$  から  $a_3$  の何倍か) のみが許される。
3. ATOMICPOSITIONS などのあとの option は、カッコをつけてはいけない。

```
&control
  calculation = 'scf'
  verbosity = 'high'
  restart_mode='from_scratch',
  pseudo_dir = '/home/amano/pseudo/'
/
&system
  ibrav = 0
  nat = 2
  ntyp = 1
  occupations = 'smearing'
  smearing = 'gaussian'
  degauss = 0.01
  ecutwfc = 100.0
/
&electrons
  diagonalization = 'david'
  conv_thr = 1.0d-8
  mixing_beta = 0.7
/
ATOMIC_SPECIES
Si 28.086 Si.pbe-n-kjpaw-psl.1.0.0.UPF

ATOMIC_POSITIONS crystal
Si 0.000 0.00 0.000
Si -0.25 0.75 -0.25
```

```
CELLPARAMETERS angstrom
-2.73308 0.00000 2.73308
0.00000 2.73308 2.73308
-2.73308 2.73308 0.00000
```

```
KPOINTS automatic
8 8 8 1 1 1
```

Si はダイヤモンド構造であり，unit cell として何を使うかは BCC，FCC，SC があり得るが，ここでは FCC を使ってみよう．そして QE で用いられている FCC の格子ベクトルを採用した．その様子を示したのが下図

そして，単純な super cell を作るのには次のようにする．

```
phonopy --qe -d --dim="2 2 2" -c Si.in
```

-c の option は inputfile の名前を指定するのに必要で，これがないとデフォルトで unitcell.in を inputfile としてしまう．また，-dim で super cell のサイズを指定している．ここでは  $2 \times 2 \times 2$  の supercell を作る．(ただし，ここで使っているのは FCC の primitive cell なので，conventional cell の 2 倍でしかないと注意しよう．また，最後にオプション -v を入れると全部の構造をアウトプットしてくれるのでおすすめ．この時のアウトプットとして primitive cell と unit cell というのが出てくるが，どちらも同じ結果が出てくるように見える．

こうして出てくるアウトプットは supercell.in と supercell-数字.in である．supercell.in には単純に元の構造の supercell が入っている．supercell-数字.in には実際に原子を displace した構造が出てくる．これらの supercell に対して scf 計算を行う，つまり，はじめの displace を作る部分はこの時点で完了してしまっているのである !! 実際の displace の数は愚直に  $2 \times 2 \times 2 = 8$  個も作るのではなく，対称性を上手く使って減らしてしまっている．実際，今の Si の例だとたった 1 つである．

```
!      ibrav = 0, nat = 16, ntyp = 1
CELLPARAMETERS bohr
-10.3295454212955349      0.0000000000000000      10.3295454212955349
0.0000000000000000      10.3295454212955349      10.3295454212955349
-10.3295454212955349      10.3295454212955349      0.0000000000000000
```

```
ATOMIC.SPECIES
```

```
Si      28.08550      Si.pbe-n-kjpaw-psl.1.0.0.UPF
```

```
ATOMIC.POSITIONS crystal
```

```
Si      0.0000000000000000      0.0000000000000000      0.0000000000000000
Si      0.5000000000000000      0.0000000000000000      0.0000000000000000
Si      0.0000000000000000      0.5000000000000000      0.0000000000000000
Si      0.5000000000000000      0.5000000000000000      0.0000000000000000
Si      0.0000000000000000      0.0000000000000000      0.5000000000000000
Si      0.5000000000000000      0.0000000000000000      0.5000000000000000
Si      0.0000000000000000      0.5000000000000000      0.5000000000000000
Si      0.5000000000000000      0.5000000000000000      0.5000000000000000
```

Si	0.8750000000000000	0.3750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.3750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.8750000000000000	0.8750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.8750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.8750000000000000	0.3750000000000000	0.3750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.3750000000000000	0.3750000000000000
Si	0.8750000000000000	0.8750000000000000	0.3750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.8750000000000000	0.3750000000000000

!      ibrav = 0, nat = 16, ntyp = 1

CELLPARAMETERS bohr

-10.3295454212955349	0.0000000000000000	10.3295454212955349
0.0000000000000000	10.3295454212955349	10.3295454212955349
-10.3295454212955349	10.3295454212955349	0.0000000000000000

ATOMIC.SPECIES

Si    28.08550    Si.pbe-n-kjpaw\_psl.1.0.0.UPF

ATOMIC.POSITIONS crystal

Si	0.0013690956423480	0.0000000000000000	0.0000000000000000
Si	0.4999999999999999	0.0000000000000000	0.0000000000000000
Si	0.0000000000000000	0.4999999999999999	0.0000000000000000
Si	0.4999999999999999	0.4999999999999999	0.0000000000000000
Si	0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.4999999999999999
Si	0.4999999999999999	0.0000000000000000	0.4999999999999999
Si	0.0000000000000000	0.4999999999999999	0.4999999999999999
Si	0.4999999999999999	0.4999999999999999	0.4999999999999999
Si	0.8750000000000000	0.3750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.3750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.8750000000000000	0.8750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.8750000000000000	0.8750000000000000
Si	0.8750000000000000	0.3750000000000000	0.3750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.3750000000000000	0.3750000000000000
Si	0.8750000000000000	0.8750000000000000	0.3750000000000000
Si	0.3750000000000000	0.8750000000000000	0.3750000000000000