

行番号	アウトライン
	<div>▼ \section{特殊な例, 他}</div> <div>▼ \subsection{電子状態密度の表示}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> 電子状態密度(DOS : Density of States)の表示は計算の妥当性を確認するために重要であり, またそれだけでなく, %状態密度とその各サイトへの射影が固体の電子状態を直接反映することから, その物性の直観的な理解にも必要不可欠である. ここでは, CUI上でのDOSの計算手法, 並びに計算後のDOS分布の表示の仕方を見ていく. なお本計算例にはDiamond構造を持つSiの共型モデルを用い, POSCARファイルを図\ref{Si-POSCAR}に示した. 結晶の対称性にはF\$\overline{4}\$3mを適用したが, これはDOSの射影の綺麗さや計算時間の短縮を重視したためである. 計算から表示までの大まかな流れは次の通りである. </div> <div>▼ \begin{enumerate}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> \item{入力ファイルの設定} \item{DOS計算の精度変更} \item{DOS分布の表示} <div>▼ \end{enumerate}</div> <div>▼ \begin{figure}[htbp]</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> <div>▼ \begin{center}</div> <div> \includegraphics[scale=0.3, bb = 0 180 1000 600]{./taniguchi/Figure/Si-POSCAR.jpg} </div> <div>▼ \caption{SiのPOSCARファイル. }</div> <div>▼ \label{Si-POSCAR}</div> <div>▼ \end{center}</div> <div>▼ \end{figure}</div> </div> <div>▼ \subsubsection{入力ファイルの設定}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> DOSの計算モードを指定するには, 入力ファイル中のINCARファイルのtagを更新する必要がある. 以下に, DOS計算の実行に関わる2種類のtagの設定内容を示した. </div> <div>▼ \paragraph{ICHARG}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> <div>まず, ICHARGの設定である. これは初期の電荷密度の導出法を決定するパラメータである. 初期値と, 各値に割り振られた導出法は次の通り.</div> <div>▼ \begin{verbatim}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> Default: ICHARG=2 if ISTART=0 <div>=0 else</div> <div>0 初期の波動関数から導出.</div> <div>1 CHGCARファイルから電荷密度を読み込み, 電荷密度の線形的な組み合わせにより新しいポジションへと外挿し導出.</div> <div>2 電荷密度の重ね合わせ (super position) により導出.</div> <div>+10 Non-selfconsistent calculation</div> </div> <div>▼ \end{verbatim}</div> <div>いずれの値でもDOS計算が実行可能で, Total DOSを得ることが出来る. ただし, partial DOSを計算したい場合には, ICHARGの値を, 元の値に10を足すことで10, 11, 12のいずれかに設定する. このときのDOS計算では, 電子計算中, 電荷密度の値は一定に保たれる. なお, partial DOSの計算結果を出力するには, INCARファイル中でNPAR=1と設定する必要がある.</div> </div> <div>▼ \paragraph{ISMEAR}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> 次に, ISMEARの設定である. これは各電子軌道に対する部分占有の設定法 (smearing) を決定する変数である. 初期値と, 各値に割り振られた手法は次の通り. </div> <div>▼ \begin{verbatim}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> Default: ISMEAR=1 <div>1..N Methfessel-Paxton法 (Nオーダー)</div> <div>0 Gaussian関数</div> <div>-1 Fermi関数</div> <div>-4 ブロッホ補正なしのTetrahedron法</div> <div>-5 ブロッホ補正ありのTetrahedron法</div> </div> <div>▼ \end{verbatim}</div> <div>このパラメータは計算対象となる物質の電気伝導により値が異なる. 例えば, 半導体や絶縁体のDOS計算において, 仮に構造モデルが大きすぎる場合, またはk点が1, 2点しかない場合には, Gaussian関数を用いた smearing (ISMEAR = 0) でその幅をSIGMA = 0.05と細かくするべきであるが, 基本的にはブロッホ補正を入れたTetrahedron法での smearing (ISMEAR = -5) を用いるほうがDOS計算の精度を保つことができる. これは, Tetrahedron法が他の手法と違ってどんな経験的なパラメータも要求しないため, 誰にでも扱える手法であるからである.</div> </div> <div>▼ \subsubsection{DOS計算の精度}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> 前小々節のようにINCARファイルのtagを設定することで, DOS計算を実行することができる. しかし, その計算の精度を変化させたい場合には, また異なったtagを更新する必要がある. 以下に, DOS計算の精度に関わる4種類のtagの設定内容を示した. </div> <div>▼ \paragraph{SIGMA}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> 初期値はSIGMA = 0.2 [eV]であり, ISMEARで設定したsmearingの幅を指定することができる. </div> <div>▼ \paragraph{EMIN, EMAX and NEDOS}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> EMIN, EMAXはそれぞれ, DOS計算によるエネルギーの最小値, 最大値である. この値を変更することで, 得られるエネルギーの範囲を指定することができる. また, NEDOSはDOS計算における格子点(grid points)の数を表している. 初期値はNEDOS = 301である. </div> <div>▼ \subsubsection{DOS分布の表示}</div> <div> <ul style="list-style-type: none"> DOSの計算が完了すると, 出力ファイルとして図\ref{DOSCAR}のようなDOSCARファイルが作成される. その記述から目的の値を抽出し作成したDOSの分布グラフが, 図\ref{Tetra_DOS_Si}である. このグラフの作成には, 数値計算用ソフトウェアであるMapleを使用した. %今回は, ICHARG = 2, ISMEAR = 0と設定し, k点が十分でなくても比較的計算精度の高いGaussian法を用いたDOS計算を行った. </div>