



Libtetraz Documentation

リリース 2.0.0

kawamura

2017年10月06日

Contents

1	はじめに	1
2	インストール方法	2
2.1	主なファイルとディレクトリ	2
2.2	要件	2
2.3	インストール手順	2
2.4	configure のオプション	4
3	ライブラリのリンク方法	5
4	各サブルーチンの説明	6
4.1	全エネルギー, 電荷密度等 (占有率の計算)	6
4.2	Fermi エネルギー (占有率も同時に計算する)	7
4.3	(部分) 状態密度	8
4.4	積分状態密度	9
4.5	ネスティング関数, Fröhlich パラメーター	10
4.6	DFPT 計算の一部	11
4.7	独立分極関数 (静的)	12
4.8	フォノン線幅等	12
4.9	分極関数 (複素振動数)	13
5	サンプルコード (抜粋)	15
6	プログラムの再配布	17
6.1	自分のプログラムに libtetrazb を含める	17
6.2	Autoconf を使わずに libtetrazb をビルドする	17
6.3	MIT ライセンス	18
7	問い合わせ先	19
8	補遺	20
8.1	逆補間	20
8.2	2重デルタ関数の積分	21
9	参考文献	23

Chapter 1

はじめに

この文書ではテトラヘドロン法ライブラリ `libtetrahz` についての解説を行っている。 `libtetrahz` は線形テトラヘドロン法もしくは最適化線形テトラヘドロン法 [1] を用いて全エネルギーや電荷密度, 部分状態密度, 分極関数等を計算するためのライブラリ群である。このライブラリには, 軌道エネルギーをインプットとして,

$$\sum_{nn'k} F(\varepsilon_{nk}, \varepsilon_{n'k+q}) X_{nn'k} = \sum_{nn'k} w_{nn'k} X_{nn'k} \quad (1.1)$$

のような積分における, 積分重み $w_{nn'k}$ を出力するサブルーチンを, 各種計算について取り揃えている。具体的には以下の計算に対応している。

$$\sum_{nk} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) X_{nk} \quad (1.2)$$

$$\sum_{nk} \delta(\omega - \varepsilon_{nk}) X_{nk}(\omega) \quad (1.3)$$

$$\sum_{nn'k} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \delta(\varepsilon_F - \varepsilon'_{n'k}) X_{nn'k} \quad (1.4)$$

$$\sum_{nn'k} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \theta(\varepsilon_{nk} - \varepsilon'_{n'k}) X_{nn'k} \quad (1.5)$$

$$\sum_{nn'k} \frac{\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \theta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_F)}{\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_{nk}} X_{nn'k} \quad (1.6)$$

$$\sum_{nn'k} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \theta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_{nk} - \omega) X_{nn'k}(\omega) \quad (1.7)$$

$$\sum_{nn'k} \frac{\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \theta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_F)}{\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_{nk} + i\omega} X_{nn'k}(\omega) \quad (1.8)$$

Chapter 2

インストール方法

主なファイルとディレクトリ

- `doc/` [マニュアルのディレクトリ]
 - `doc/index.html`: 目録ページ
- `src/`: ライブラリのソースコードのディレクトリ
- `example/`: ライブラリ使用例のディレクトリ
- `test/`: ライブラリのビルドのテスト用ディレクトリ
- `configure`: ビルド環境設定用スクリプト

要件

以下のものが必要となる.

- fortran および C コンパイラ
- MPI ライブラリ (MPI/ハイブリッド並列版を利用する場合)

インストール手順

1. 以下の場所から `.tar.gz` ファイルをダウンロードする.

<http://osdn.jp/projects/libtetrabz/releases/>

2. ダウンロードした `.tar.gz` ファイルを展開し, 出来たディレクトリに入る.

```
$ tar xzvf libtetrabz-version.tar.gz
$ cd libtetrabz-version
```

3. ビルド環境を設定する.

```
$ ./configure --prefix=install_dir
```

これにより、ビルドに必要なコンパイラやライブラリ等の環境のチェックが行われ、Makefile 等が作成される。ただし `install_dir` はインストール先のディレクトリの絶対パスとする (以後各自のディレクトリ名で読み替えること)。なにも指定しないと `/usr/local/` が設定され、後述の `make install` で `/usr/local/lib` 内にライブラリが置かれる (したがって、管理者権限がない場合には `install_dir` を別の場所に指定しなければならない)。`configure` にはこの他にも様々なオプションがあり、必要に応じて用途や環境に合わせてそれらを使用する。詳しくは [configure のオプション](#) を参照。

4. `configure` の実行が正常に行われ、`Makefile` が生成された後は

```
$ make
```

とタイプしてライブラリ等のビルドを行う。これが成功したのちに

```
$ make install
```

とすると、ライブラリが `install_dir/lib` に置かれる。`make install` をしなくても、ビルドをしたディレクトリ内にあるライブラリやミニアプリを使うことは可能であるが、使い勝手がやや異なる。

5. 共有リンクを行ったプログラムの実行時にライブラリを探しにいけるよう、環境変数 `LD_LIBRARY_PATH` に `libtetraz` をインストールしたディレクトリを追加する。

```
$ export LD_LIBRARY_PATH=${LD_LIBRARY_PATH}:install_dir/lib
```

6. また、`example/` 以下のライブラリ使用例のプログラムもコンパイルされる。

`example/dos.x`: 立法格子シングルバンドタイトバインディングモデルの DOS を計算する。ソースコードは `dos.f90`

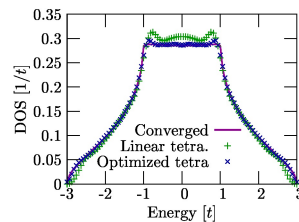


図 2.1: `dos.x` を使って計算した、立法格子タイトバインディングモデルの状態密度。実線は十分多くの k 点を利用した時の結果。 ”+”, ”×” はそれぞれ $8 \times 8 \times 8k$ グリッドでの線形テトラヘドロン法および最適化テトラヘドロン法の結果。

`example/lindhard.x`: リントハルト関数を計算する。ソースコードは `lindhard.f90`

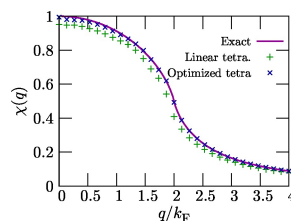


図 2.2: `lindhard.x` を使って計算した Lindhard 関数。実線は解析的な結果。 ”+”, ”×” はそれぞれ $8 \times 8 \times 8k$ グリッドでの線形テトラヘドロン法および最適化テトラヘドロン法の結果。

configure のオプション

configure には多数のオプションと変数があり、それらを組み合わせて指定する。指定しない場合にはデフォルト値が使われる。

```
$ ./configure --prefix=/home/libtetrazb/ --with-mpi=yes FC=mpif90
```

おもなものを次に挙げる。

---prefix

デフォルト: ---prefix=/usr/local/. ライブラリ等のインストールを行うディレクトリツリーを指定する。

--with-mpi

デフォルト: --with-mpi=no (MPI を用いない). MPI を用いるか (--with-mpi=yes), 否かを指定する。

--with-openmp

デフォルト: --with-openmp=yes (OpenMP を用いる). OpenMP を用いるか否か (--with-openmp=no) を指定する。

--enable-shared

デフォルト: --enable-shared. 共有ライブラリを作成するか否か

--enable-static

デフォルト: --enable-static. 静的ライブラリを作成するか否か。

FC, CC

デフォルト: システムにインストールされている fortran/C コンパイラをスキャンして、自動的に設定する。--with-mpi を指定した時にはそれに応じたコマンド (mpif90 等) を自動で探し出して設定する。configure の最後に出力される FC が望んだものでは無かった場合には ./configure FC=gfortran のように手で指定する。

--help

このオプションを指定した時には、ビルドの環境設定は行われず、上記を含めたすべてのオプションを表示する。

Chapter 3

ライブラリのリンク方法

例/ intel fortran の場合

```
$ ifort program.f90 -L install_dir/lib -I install_dir/include -ltetrabz -fopenmp  
$ mpiifort program.f90 -L install_dir/lib -I install_dir/include -ltetrabz -fopenmp
```

例/ intel C の場合

```
$ icc -lifcore program.f90 -L install_dir/lib -I install_dir/include -ltetrabz -fopenmp  
$ mpiicc -lifcore program.f90 -L install_dir/lib -I install_dir/include -ltetrabz_mpi -fopenmp
```

Chapter 4

各サブルーチンの説明

以下のサブルーチンを任意のプログラム内で

```
USE libtetraubz, ONLY : libtetraubz_occ  
CALL libtetraubz_occ (ltetra, bvec, nb, nge, eig, ngw, wght)
```

のように呼び出して使用できる。サブルーチン名はすべて libtetraubz_ から始まる。

C 言語で書かれたプログラムから呼び出す場合には次のようにする。

```
#include "libtetraubz.h"  
  
libtetraubz_occ (&ltetra, bvec, &nb, nge, eig, ngw, wght)
```

変数はすべてポインタとして渡す。配列はすべて 1 次元配列として定義し一番左の添字が内側のループとなるようにする。また MPI/ハイブリッド並列のときにライブラリに渡すコミュニケーター変数を、次のように C/C++ のものから fortran のものに変換する。

```
comm_f = MPI_Comm_c2f(comm_c);
```

全エネルギー、電荷密度等 (占有率の計算)

$$\sum_{nk} \theta(\epsilon_F - \epsilon_{nk}) X_{nk} \quad (4.1)$$

```
CALL libtetraubz_occ (ltetra, bvec, nb, nge, eig, ngw, wght, comm)
```

パラメーター

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra
```

テトラヘドロン法の種類を決める。1…線形テトラヘドロン法, 2…最適化線形テトラヘドロン法 [1]

```
REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)
```

逆格子ベクトル。単位は任意で良い。逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため、それらの長さの比のみが必要であるため。

INTEGER, INTENT (IN) :: nb

バンド本数

INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)

軌道エネルギーのメッシュ数.

REAL (8), INTENT (IN) :: eig (nb, nge (1), nge (2), nge (3))

軌道エネルギー. Fermi エネルギーを基準とすること ($\epsilon_F = 0$).

INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)

ngw (3) : (入力, 整数配列) 積分重みの k メッシュ. nge と違っていても構わない(補遺参照).

REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))

wght (nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3)) : (出力, 実数配列) 積分重み

INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm

オプション引数. MPI のコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など) を入れる. libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する. C 言語では使用しないときには NULL を入れる.

Fermi エネルギー (占有率も同時に計算する)

$$\sum_{nk} \theta(\epsilon_F - \epsilon_{nk}) X_{nk} \quad (4.2)$$

CALL libtetrabz_fermieng (ltetra, bvec, nb, nge, eig, ngw, wght, ef, nelecc, comm)

パラメーター

INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra

テトラヘドロン法の種類を決める. 1... 線形テトラヘドロン法, 2... 最適化線形テトラヘドロン法 [1]

REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)

逆格子ベクトル. 単位は任意で良い. 逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため, それらの長さの比のみが必要であるため.

INTEGER, INTENT (IN) :: nb

バンド本数

INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)

軌道エネルギーのメッシュ数.

REAL (8), INTENT (IN) :: eig (nb, nge (1), nge (2), nge (3))

軌道エネルギー.

INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)

軌道エネルギーのメッシュ数.

INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)

積分重みの k メッシュ. nge と違っていても構わない(補遺 参照).

REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))

積分重み

REAL (8), INTENT (OUT) :: ef

Fermi エネルギー

REAL (8), INTENT (IN) :: nelec

スピンあたりの (荷) 電子数

INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm

オプション引数. MPIのコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など)を入れる. libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する. C 言語では使用しないときには NULL を入れる.

(部分) 状態密度

$$\sum_{nk} \delta(\omega - \varepsilon_{nk}) X_{nk}(\omega) \quad (4.3)$$

CALL libtetrabz_dos (ltetra, bvec, nb, nge, eig, ngw, wght, ne, e0, comm)

パラメーター

INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra

テトラヘドロン法の種類を決める. 1... 線形テトラヘドロン法, 2... 最適化線形テトラヘドロン法 [1]

REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)

逆格子ベクトル. 単位は任意で良い. 逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため, それらの長さの比のみが必要であるため.

INTEGER, INTENT (IN) :: nb

バンド本数

INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)

軌道エネルギーの k メッシュ数.

REAL (8), INTENT (IN) :: eig (nb, nge (1), nge (2), nge (3))

軌道エネルギー.

INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)

積分重みの k メッシュ. nge と違っていても構わない(補遺 参照).

REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (ne, nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))

積分重み

INTEGER, INTENT (IN) :: ne

状態密度を計算するエネルギー点数

REAL (8), INTENT (IN) :: e0 (ne)

状態密度を計算するエネルギー

INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm

オプション引数. MPIのコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など)を入れる. libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する. C 言語では使用しないときには NULL を入れる.

積分状態密度

$$\sum_{nk} \theta(\omega - \varepsilon_{nk}) X_{nk}(\omega) \quad (4.4)$$

CALL libtetrabz_intdos (ltetra, bvec, nb, nge, eig, ngw, wght, ne, e0, comm)

パラメーター

INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra

テトラヘドロン法の種類を決める. 1... 線形テトラヘドロン法, 2... 最適化線形テトラヘドロン法 [1]

REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)

逆格子ベクトル. 単位は任意で良い. 逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため, それらの長さの比のみが必要であるため.

INTEGER, INTENT (IN) :: nb

バンド本数

INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)

軌道エネルギーの k メッシュ数.

REAL (8), INTENT (IN) :: eig (nb, nge (1), nge (2), nge (3))

軌道エネルギー.

INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)

積分重みの k メッシュ. nge と違っていても構わない(補遺 参照).

```
REAL(8), INTENT(OUT) :: wght(ne, nb, ngw(1), ngw(2), ngw(3))
```

積分重み

```
INTEGER, INTENT(IN) :: ne
```

状態密度を計算するエネルギー点数

```
REAL(8), INTENT(IN) :: e0(ne)
```

状態密度を計算するエネルギー

```
INTEGER, INTENT(IN), OPTIONAL :: comm
```

オプション引数. MPIのコミュニケーター(MPI_COMM_WORLDなど)を入れる. libtetrazを内部でMPI/Hybrid並列するときのみ入力する. C言語では使用しないときにはNULLを入れる.

ネスティング関数, Fröhlich パラメーター

$$\sum_{nn'k} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \delta(\varepsilon_F - \varepsilon'_{n'k}) X_{nn'k} \quad (4.5)$$

```
CALL libtetraz_dbldelta(ltetra, bvec, nb, nge, eig1, eig2, ngw, wght, comm)
```

パラメーター

```
INTEGER, INTENT(IN) :: ltetra
```

テトラヘドロン法の種類を決める. 1...線形テトラヘドロン法, 2...最適化線形テトラヘドロン法 [1]

```
REAL(8), INTENT(IN) :: bvec(3, 3)
```

逆格子ベクトル. 単位は任意で良い. 逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため, それらの長さの比のみが必要であるため.

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nb
```

バンド本数

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nge(3)
```

軌道エネルギーの k メッシュ数.

```
REAL(8), INTENT(IN) :: eig1(nb, nge(1), nge(2), nge(3))
```

軌道エネルギー. Fermi エネルギーを基準とすること ($\varepsilon_F = 0$). eig2 も同様.

```
REAL(8), INTENT(IN) :: eig2(nb, nge(1), nge(2), nge(3))
```

軌道エネルギー. 移行運動量のみだけグリッドをずらしたものなど.

```
INTEGER, INTENT(IN) :: ngw(3)
```

積分重みの k メッシュ. nge と違っていても構わない(補遺 参照).

```
REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (nb, nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))
```

積分重み

```
INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm
```

オプション引数. MPIのコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など)を入れる. libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する. C 言語では使用しないときには NULL を入れる.

DFPT 計算の一部

$$\sum_{nn'/k} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \theta(\varepsilon_{nk} - \varepsilon'_{n'k}) X_{nn'k} \quad (4.6)$$

```
CALL libtetrabz_dbstep (ltetra, bvec, nb, nge, eig1, eig2, ngw, wght, comm)
```

パラメーター

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra
```

テトラヘドロン法の種類を決める. 1... 線形テトラヘドロン法, 2... 最適化線形テトラヘドロン法 [1]

```
REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)
```

逆格子ベクトル. 単位は任意で良い. 逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため, それらの長さの比のみが必要であるため.

```
INTEGER, INTENT (IN) :: nb
```

バンド本数

```
INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)
```

軌道エネルギーのメッシュ数.

```
REAL (8), INTENT (IN) :: eig1 (nb, nge (1), nge (2), nge (3))
```

軌道エネルギー. Fermi エネルギーを基準とすること ($\varepsilon_F = 0$). eig2 も同様.

```
REAL (8), INTENT (IN) :: eig2 (nb, nge (1), nge (2), nge (3))
```

軌道エネルギー. 移行運動量の分だけグリッドをずらしたものなど.

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)
```

積分重みの k メッシュ. nge と違っていても構わない(補遺 参照).

```
REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (nb, nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))
```

積分重み

```
INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm
```

オプション引数. MPIのコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など)を入れる. libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する. C 言語では使用しないときには NULL を入れる.

独立分極関数 (静的)

$$\sum_{nn'k} \frac{\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk})\theta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_F)}{\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_{nk}} X_{nn'k} \quad (4.7)$$

```
CALL libtetrabz_polstat (ltetra, bvec, nb, nge, eig1, eig2, ngw, wght, comm)
```

パラメーター

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra
```

テトラヘドロン法の種類を決める。1…線形テトラヘドロン法, 2…最適化線形テトラヘドロン法 [1]

```
REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)
```

逆格子ベクトル。単位は任意で良い。逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため、それらの長さの比のみが必要であるため。

```
INTEGER, INTENT (IN) :: nb
```

バンド本数

```
INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)
```

軌道エネルギーのメッシュ数。

```
REAL (8), INTENT (IN) :: eig1 (nb, nge (1), nge (2), nge (3))
```

軌道エネルギー。Fermi エネルギーを基準とすること ($\varepsilon_F = 0$)。eig2 も同様。

```
REAL (8), INTENT (IN) :: eig2 (nb, nge (1), nge (2), nge (3))
```

軌道エネルギー。移行運動量の分だけグリッドをずらしたのなど。

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)
```

積分重みの k メッシュ。nge と違っていても構わない(補遺 参照)。

```
REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (nb, nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))
```

積分重み

```
INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm
```

オプション引数。MPIのコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など)を入れる。libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する。C 言語では使用しないときには NULL を入れる。

フォノン線幅等

$$\sum_{nn'k} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk})\theta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_F)\delta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_{nk} - \omega)X_{nn'k}(\omega) \quad (4.8)$$


```
CALL libtetrabz_fermigr (ltetra, bvec, nb, nge, eig1, eig2, ngw, wght, ne, e0, comm)
```

パラメーター

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ltetra
```

テトラヘドロン法の種類を決める。1…線形テトラヘドロン法, 2…最適化線形テトラヘドロン法 [1]

```
REAL (8), INTENT (IN) :: bvec (3, 3)
```

逆格子ベクトル。単位は任意で良い。逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため、それらの長さの比のみが必要であるため。

```
INTEGER, INTENT (IN) :: nb
```

バンド本数

```
INTEGER, INTENT (IN) :: nge (3)
```

軌道エネルギーのメッシュ数。

```
REAL (8), INTENT (IN) :: eig1 (nb, nge (1), nge (2), nge (3))
```

軌道エネルギー。Fermi エネルギーを基準とすること ($\varepsilon_F = 0$)。eig2 も同様。

```
REAL (8), INTENT (IN) :: eig2 (nb, nge (1), nge (2), nge (3))
```

軌道エネルギー。移行運動量の分だけグリッドをずらしたものなど。

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ngw (3)
```

積分重みの k メッシュ。nge と違っていても構わない(補遺 参照)。

```
REAL (8), INTENT (OUT) :: wght (ne, nb, nb, ngw (1), ngw (2), ngw (3))
```

積分重み

```
INTEGER, INTENT (IN) :: ne
```

フォノンモード数

```
REAL (8), INTENT (IN) :: e0 (ne)
```

フォノン振動数

```
INTEGER, INTENT (IN), OPTIONAL :: comm
```

オプション引数。MPIのコミュニケーター (MPI_COMM_WORLD など)を入れる。libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する。C 言語では使用しないときには NULL を入れる。

分極関数 (複素振動数)

$$\sum_{nn'/k} \frac{\theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk})\theta(\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_F)}{\varepsilon'_{n'k} - \varepsilon_{nk} + i\omega} X_{nn'/k}(\omega) \quad (4.9)$$

```
CALL libtetrabz_polcplx(ltetra,bvec,nb,nge,eig1,eig2,ngw,wght,ne,e0,comm)
```

パラメーター

```
INTEGER, INTENT(IN) :: ltetra
```

テトラヘドロン法の種類を決める。1…線形テトラヘドロン法, 2…最適化線形テトラヘドロン法 [1]

```
REAL(8), INTENT(IN) :: bvec(3,3)
```

逆格子ベクトル。単位は任意で良い。逆格子の形によって四面体の切り方を決めるため、それらの長さの比のみが必要であるため。

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nb
```

バンド本数

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nge(3)
```

軌道エネルギーのメッシュ数。

```
REAL(8), INTENT(IN) :: eig1(nb, nge(1), nge(2), nge(3))
```

軌道エネルギー。Fermi エネルギーを基準とすること ($\epsilon_F = 0$)。eig2 も同様。

```
REAL(8), INTENT(IN) :: eig2(nb, nge(1), nge(2), nge(3))
```

軌道エネルギー。移行運動量の分だけグリッドをずらしたのなど。

```
INTEGER, INTENT(IN) :: ngw(3)
```

積分重みの k メッシュ。nge と違っていても構わない(補遺 参照)。

```
COMPLEX(8), INTENT(OUT) :: wght(ne, nb, nb, ngw(1), ngw(2), ngw(3))
```

積分重み。

```
INTEGER, INTENT(IN) :: ne
```

計算を行う虚振動数の点数

```
COMPLEX(8), INTENT(IN) :: e0(ne)
```

計算を行う複素振動数

```
INTEGER, INTENT(IN), OPTIONAL :: comm
```

オプション引数。MPIのコミュニケーター(MPI_COMM_WORLD など)を入れる。libtetrabz を内部で MPI/Hybrid 並列するときのみ入力する。C 言語では使用しないときには NULL を入れる。

Chapter 5

サンプルコード (抜粋)

以下では電荷密度

$$\rho(r) = 2 \sum_{nk} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) |\varphi_{nk}(r)|^2 \quad (5.1)$$

を計算するサブルーチンを示す.

```
SUBROUTINE calc_rho(nr,nb,ng,nelec,bvec,eig,ef,phi,rho)
!
USE libtetrabz, ONLY : libtetrabz_fermieng
IMPLICIT NONE
!
INTEGER, INTENT(IN) :: nr ! number of r
INTEGER, INTENT(IN) :: nb ! number of bands
INTEGER, INTENT(IN) :: ng(3)
! k-point mesh
REAL(8), INTENT(IN) :: nelec ! number of electrons per spin
REAL(8), INTENT(IN) :: bvec(3,3) ! reciprocal lattice vector
REAL(8), INTENT(IN) :: eig(nb,ng(1),ng(2),ng(3)) ! Kohn-Sham eigenvalues
REAL(8), INTENT(OUT) :: ef ! Fermi energy
COMPLEX(8), INTENT(IN) :: phi(nr,nb,ng(1),ng(2),ng(3)) ! Kohn-Sham orbitals
REAL(8), INTENT(OUT) :: rho(nr) ! Charge density
!
INTEGER :: ib, i1, i2, i3, ltetra
REAL(8) :: wght(nb,ng(1),ng(2),ng(3))
!
ltetra = 2
!
CALL libtetrabz_fermieng(ltetra,bvec,nb,ng,eig,ng,wght,ef,nelec)
!
rho(1:nr) = 0d0
DO i1 = 1, ng(3)
  DO i2 = 1, ng(2)
    DO i1 = 1, ng(1)
      DO ib = 1, nb
        rho(1:nr) = rho(1:nr) + 2d0 * wght(ib,i1,i2,i3) &
          & * DBLE(CONJG(phi(1:nr,ib,i1,i2,i3)) * phi(1:nr,ib,i1,i2,i3))
      END DO
    END DO
  END DO
END DO
END DO
```

```
!  
END SUBROUTINE calc_rho
```

Chapter 6

プログラムの再配布

自分のプログラムに **libtetrabz** を含める

libtetrabz は下記の *MIT* ライセンス に基づいて配布されている。これはかいつまんで言うと、個人的 (研究室や共同研究者等のグループ) なプログラムであろうとも、公開したり売ったりするプログラムであろうとも自由にコピーしたり改変して良いし、どのようなライセンスで配布しても構わない、ということである。

Autoconf を使わずに **libtetrabz** をビルドする

このパッケージでは Autotools (Autoconf, Aptomake, Libtool) を使って libtetrabz をビルドしている。もし再配布するソースコードに libtetrabz を含めるときに、Autoconf の使用に支障がある場合には、以下の簡易版の Makefile を使うと良い (タブに注意)。

```
F90 = gfortran
FFLAGS = -fopenmp -O2 -g

OBJS = \
libtetrabz.o \
libtetrabz_dbldelta_mod.o \
libtetrabz_dblstep_mod.o \
libtetrabz_dos_mod.o \
libtetrabz_fermigr_mod.o \
libtetrabz_occ_mod.o \
libtetrabz_polcplx_mod.o \
libtetrabz_polstat_mod.o \
libtetrabz_common.o

.SUFFIXES :
.SUFFIXES : .o .F90

libtetrabz.a:$(OBJS)
    ar cr $@ $(OBJS)

.F90.o:
    $(F90) $(FFLAGS) -c $<

clean:
    rm -f *.a *.o *.mod
```

```
libtetrabz.o:libtetrabz_polcplx_mod.o
libtetrabz.o:libtetrabz_fermigr_mod.o
libtetrabz.o:libtetrabz_polstat_mod.o
libtetrabz.o:libtetrabz_dbldelta_mod.o
libtetrabz.o:libtetrabz_dblstep_mod.o
libtetrabz.o:libtetrabz_dos_mod.o
libtetrabz.o:libtetrabz_occ_mod.o
libtetrabz_dbldelta_mod.o:libtetrabz_common.o
libtetrabz_dblstep_mod.o:libtetrabz_common.o
libtetrabz_dos_mod.o:libtetrabz_common.o
libtetrabz_fermigr_mod.o:libtetrabz_common.o
libtetrabz_occ_mod.o:libtetrabz_common.o
libtetrabz_polcplx_mod.o:libtetrabz_common.o
libtetrabz_polstat_mod.o:libtetrabz_common.o
```

MIT ライセンス

Copyright (c) 2014 Mitsuaki Kawamura

以下に定める条件に従い、
本ソフトウェアおよび関連文書のファイル（以下「ソフトウェア」）
の複製を取得するすべての人に対し、
ソフトウェアを無制限に扱うことを無償で許可します。これには、
ソフトウェアの複製を使用、複写、変更、結合、掲載、頒布、サブライセンス、
および/または販売する権利、
およびソフトウェアを提供する相手に同じことを許可する権利も無制限に含まれます。

上記の著作権表示および本許諾表示を、
ソフトウェアのすべての複製または重要な部分に記載するものとします。

ソフトウェアは「現状のまま」で、明示であるか暗黙であるかを問わず、
何らの保証もなく提供されます。ここでいう保証とは、商品性、
特定の目的への適合性、および権利非侵害についての保証も含まれますが、
それに限定されるものではありません。作者または著作権者は、契約行為、
不法行為、またはそれ以外であろうと、ソフトウェアに起因または関連し、
あるいはソフトウェアの使用またはその他の扱いによって生じる一切の請求、
損害、その他の義務について何らの責任も負わないものとします。

Chapter 7

問い合わせ先

プログラムのバグや質問は以下のフォーラムへご投稿ください。

<http://sourceforge.jp/projects/libtetrabz/forums/>

開発に参加したい方は以下の連絡先にて受け付けております。

東京大学物性研究所

河村光晶

mkawamura__at__issp.u-tokyo.ac.jp

Chapter 8

補遺

逆補間

積分

$$\langle X \rangle = \sum_k X_k w(\varepsilon_k) \quad (8.1)$$

を計算するとする。このとき、

- w は ε_k に敏感な関数 (階段関数・デルタ関数等) であり、なるべく細かいグリッド上の ε_k が必要である。
- X_k を求めるための計算コストが ε_k の計算コストよりかなり大きい。

という場合には X_k のグリッドを補間により増やす方法が有効である。それは、

1. ε_k を細かい k グリッド上で計算する。
2. X_k を粗いグリッド上で計算し、それを補間 (線形補間, 多項式補間, スプライン補間など) して細かいグリッド上での値を得る。

$$X_k^{\text{dense}} = \sum_{k'}^{\text{coarse}} F_{kk'} X_{k'}^{\text{coarse}} \quad (8.2)$$

1. 細かい k グリッドで上記の積分を行う。

$$\langle X \rangle = \sum_k^{\text{dense}} X_k^{\text{dense}} w_k^{\text{dense}} \quad (8.3)$$

という流れで行われる。

さらに、この計算と同じ結果を得るように粗いグリッド上での積分重み w_k^{coarse} を w_k^{dense} から求める逆補間 ([2] の Appendix) も可能である。すなわち、

$$\sum_k^{\text{dense}} X_k^{\text{dense}} w_k^{\text{dense}} = \sum_k^{\text{coarse}} X_k^{\text{coarse}} w_k^{\text{coarse}} \quad (8.4)$$

が満たされる事を要請すると

$$w_k^{\text{coarse}} = \sum_k^{\text{dense}} F_{k'k} w_{k'}^{\text{dense}} \quad (8.5)$$

となる。この場合の計算手順は、

1. 細かい k グリッド上の ε_k から w_k^{dense} を計算する.
2. 逆補間により w_k^{coarse} を求める.
3. 粗いグリッド上での X_k との積和を行う.

となる. このライブラリ内の全ルーチンはこの逆補間の機能を備えており, 軌道エネルギーの k グリッドと重み関数の k グリッドを異なる値にすると逆補間された w_k^{coarse} が出力される.

2重デルタ関数の積分

For the integration

$$\sum_{nn'k} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{nk}) \delta(\varepsilon_F - \varepsilon'_{n'k}) X_{nn'k} \quad (8.6)$$

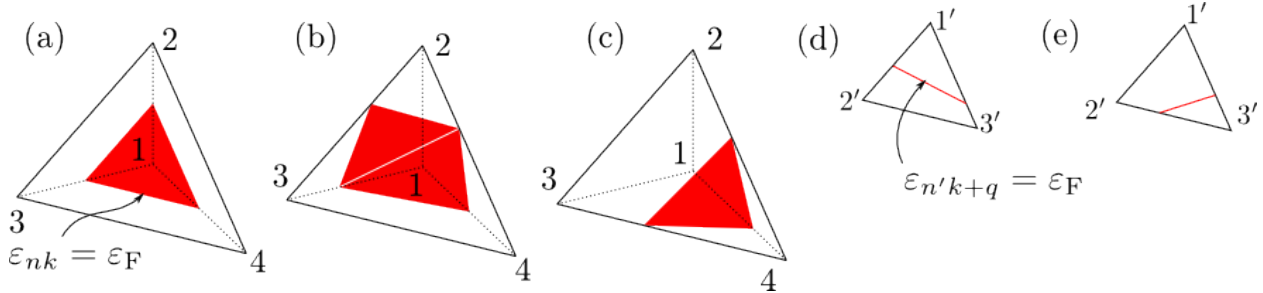
first, we cut out one or two triangles where $\varepsilon_{nk} = \varepsilon_F$ from a tetrahedron and evaluate $\varepsilon_{n'k+q}$ at the corners of each triangles as

$$\varepsilon_i'^{k+q} = \sum_{j=1}^4 F_{ij}(\varepsilon_1^k, \dots, \varepsilon_4^k, \varepsilon_F) \varepsilon_j^{k+q}. \quad (8.7)$$

Then we calculate $\delta(\varepsilon_{n'k+q} - \varepsilon_F)$ in each triangles and obtain weights of corners. This weights of corners are mapped into those of corners of the original tetrahedron as

$$W_i = \sum_{j=1}^3 \frac{S}{\nabla_k \varepsilon_k} F_{ji}(\varepsilon_1^k, \dots, \varepsilon_4^k, \varepsilon_F) W'_j. \quad (8.8)$$

F_{ij} and $\frac{S}{\nabla_k \varepsilon_k}$ are calculated as follows ($a_{ij} \equiv (\varepsilon_i - \varepsilon_j)/(\varepsilon_F - \varepsilon_j)$):



☒ 8.1: How to divide a tetrahedron in the case of $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_2$ (a), $\varepsilon_2 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_3$ (b), and $\varepsilon_3 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_4$ (c).

- When $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \leq \varepsilon_4$ [Fig. 8.1 (a)],

$$F = \begin{pmatrix} a_{12} & a_{21} & 0 & 0 \\ a_{13} & 0 & a_{31} & 0 \\ a_{14} & 0 & 0 & a_{41} \end{pmatrix}, \quad \frac{S}{\nabla_k \varepsilon_k} = \frac{3a_{21}a_{31}a_{41}}{\varepsilon_F - \varepsilon_1} \quad (8.9)$$

- When $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_3 \leq \varepsilon_4$ [Fig. 8.1 (b)],

$$F = \begin{pmatrix} a_{13} & 0 & a_{31} & 0 \\ a_{14} & 0 & 0 & a_{41} \\ 0 & a_{24} & 0 & a_{42} \end{pmatrix}, \quad \frac{S}{\nabla_k \varepsilon_k} = \frac{3a_{31}a_{41}a_{24}}{\varepsilon_F - \varepsilon_1} \quad (8.10)$$

$$F = \begin{pmatrix} a_{13} & 0 & a_{31} & 0 \\ 0 & a_{23} & a_{32} & 0 \\ 0 & a_{24} & 0 & a_{42} \end{pmatrix}, \quad \frac{S}{\nabla_k \varepsilon_k} = \frac{3a_{23}a_{31}a_{42}}{\varepsilon_F - \varepsilon_1} \quad (8.11)$$

- When $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_4$ [Fig. 8.1 (c)],

$$F = \begin{pmatrix} a_{14} & 0 & 0 & a_{41} \\ a_{13} & a_{24} & 0 & a_{42} \\ a_{12} & 0 & a_{34} & a_{43} \end{pmatrix}, \quad \frac{S}{\nabla_k \varepsilon_k} = \frac{3a_{14}a_{24}a_{34}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_F} \quad (8.12)$$

Weights on each corners of the triangle are computed as follows [$a'_{ij} \equiv (\varepsilon'_i - \varepsilon'_j)/(\varepsilon_F - \varepsilon'_j)$]:

- When $\varepsilon'_1 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon'_2 \leq \varepsilon'_3$ [Fig. 8.1 (d)],

$$W'_1 = L(a'_{12} + a'_{13}), \quad W'_2 = La'_{21}, \quad W'_3 = La'_{31}, \quad L \equiv \frac{a'_{21}a'_{31}}{\varepsilon_F - \varepsilon'_1} \quad (8.13)$$

- When $\varepsilon'_1 \leq \varepsilon'_2 \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon'_3$ [Fig. 8.1 (e)],

$$W'_1 = La'_{13}, \quad W'_2 = La'_{23}, \quad W'_3 = L(a'_{31} + a'_{32}), \quad L \equiv \frac{a'_{13}a'_{23}}{\varepsilon'_3 - \varepsilon_F} \quad (8.14)$$

Chapter 9

参考文献

- [1] M. Kawamura, Y. Gohda, and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B 89, 094515 (2014).
- [2] M. Kawamura, R. Akashi, and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B 95, 054506 (2017).