

⑧ SCAL *new version*

EXTDH で計算した分子軌道を用い、分子軌道の分子間の重なりを求めるプログラムである。旧来の SCAL との相違は

- ① 従来 MERGE で行なっていた 2 つ以上の独立な分子の MO のとりこみが可能にした。
- ② 対称操作によって移される単位胞中の分子の MO もプログラム中で作り出せる。

の 2 点である。

§1. 予備知識

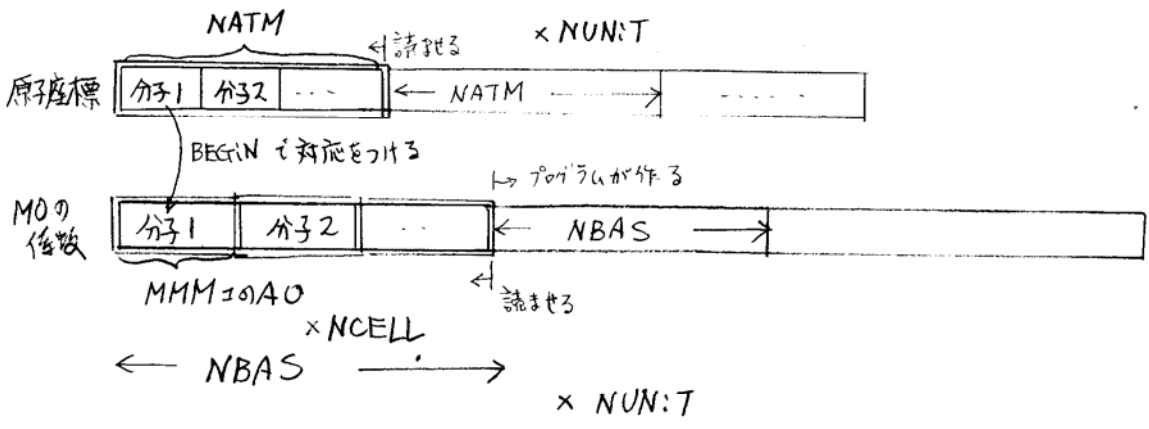
分子性結晶では一般に単位胞中に複数の分子を持つ事が多いから、これらには

- (1) 結晶学的に独立な分子
- (2) (1) から対称操作によって作られる分子

の 2 種類がある。本プログラムでは

- (1) 独立な分子の座標はすべて並べて NATM コ 読ませる。また独立な分子の分子軌道は分子 1 コずつ計算しておき、各々 MMM コ (分子 1 コあたりの AO の個数) の AO を順に NCELL コ 読ませる。
- (2) 以上の全体に NUN:T コの対称操作をほどこして単位胞の分子をすべて作る。この場合対称操作によって原子座標のみでなく分子軌道の係数も変化を受けるが、この変換も自動的にこなう。

よって原子座標、分子軌道の係数は下のように拡張される。



5.2. 使用法

FT(LIN)F001

- | | | | |
|-----|---|-------------------|-----------|
| 1. | LIN, LOUT, LFiN | (3I4) | |
| 2. | NATM | (I4) | |
| 3. | NSP, X, Y, Z | (I4, IX, 3F10.0) | } NATM 回 |
| 4. | blank | | |
| 5. | TLAM, NAOB | (A4, I4) | |
| 6. | NAT, LAT, ZST, HAT | (2I4, 2X, 2F10.0) | } NMAX 回 |
| 7.* | NZD, (ZSID, CODT)×3 | (I4, IX, 6F10.0) | |
| 8. | blank | | |
| 9. | CONSK, IRES | (F10.0, 10X, I5) | |
| 10. | CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMMA | (6F10.0) | |
| 11. | CK(1) ~ CK(12) | (6F5.0) | } NUMIT 回 |
| 12. | 10.0 | | |
| 13. | MMM, NCELL, NSY(1), NSY(2)... | (8I5) | |
| 14. | GT(1), GT(2), GT(3) | (3F5.0) | } NLG 回 |
| 15. | 10.0 | | |
| 16. | LU, LLA, LLB | (3I5) | } NL 回 |
| 17. | blank 2枚 | | |

FT(NSY)F001

- | | | | |
|----|------------|-----------|------|
| 1. | MO | (I5) | |
| 2. | } 2行 blank | | |
| 3. | | | |
| 4. | CE(I) | (12F10.0) | MO 1 |

1. LIN, LOUT, LFiN (3I4) 入出力機番
 LIN 入力機番 (標準値 5)
 LOUT 読みこんだ MO および直交化した座標を出力する機番
 LOUT > 90 と 43 と 直交座標を出力しない (標準値 6)
 LFiN 出力機番 (")

2. NATM (I4)
 NATM 次の行から入力する原子の数。
 NATM = 0 とすれば blank が来るまで読み。
 独立な全分子の座標を順に入力する。

3. NSP, X, Y, Z (I4, IX, 3F10.0)
 NSP 原子の種類
 二の上に NSP 番目のカード5. の AO を置く。
 X, Y, Z, 原子座標

5. TLAM, NAQB (A4, I4)
 TLAM 原子の名称
 NAQB 二の原子上の AO の種類の数. カード6の枚数.

6. NAT, LAT, ZST, HST (2I4, 2X, 2F10.0)
 NAT AO の主量子数 n
 LAT " 方位量子数 l $l=0, 1, 2$ は s, p, d
 ZST J ; 2-5, 3-5 の時は 0 とし カード7. をおく
 HST E ; Ryd.

7. * NZT, (ZSID, CODT) x 3 (I4, IX, 6F10.0) ZST=0 の場合
 NZT = 2 double ξ
 3 triple ξ
 ZSID ξ_1, ξ_2, ξ_3 } $\chi_{A_0} = c_1 \chi(\xi_1) + c_2 \chi(\xi_2) + c_3 \chi(\xi_3)$
 CODT c_1, c_2, c_3 }

以上の入力は EXTDH と同様である。

9. CONSK, IRES (F10.0, 10X, I5)
 CONSK H を計算する時の K) EXTDH と同じ
 IRES " 計算式

10. CELLA, CELLB, CELLC, ALPHA, BETA, GAMMA (6F10.0)
 格子定数 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
 $(\overset{A}{\underset{0 \text{ 左} = a}{\alpha}})$ $(\overset{0}{\underset{0 \text{ 左} \text{ 標準値 } 90.0}{\beta}})$

3. CK(1) ~ CK(12) (6F5.0)

単位胞中の別分子を作る対称操作

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} CK(1) & CK(2) & CK(3) \\ CK(4) & CK(5) & CK(6) \\ CK(7) & CK(8) & CK(9) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CK(10) \\ CK(11) \\ CK(12) \end{pmatrix}$$

1枚目に恒等変換が必要。UNIT枚くり返す
CK(1) ≥ 10.0 が現れると次へ行く。

4. MMM, NCELL, NSY(1) ~ NSY(6) (8I5)

MMM この分子上のMOを作るAOの数

NCELL 独立な分子数。可能な番号 NSY(1) ~ 6読み込むMOの数

NCELL ≤ 6

NSY(1) ~ NSY(6) MOを入力する番号の番号

NSY(n) ≤ 5 とすると NCELL の値にかかわらず入力
打止めて次へ行く。

5. GT(1), GT(2), GT(3) (3F5.0)

隣の単位胞を作る並進ベクトル (最初 0.0, 0.0, 0.0 を入れる)

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} GT(1) \\ GT(2) \\ GT(3) \end{pmatrix}$$

NLG 行くり返す NLG ≤ 10

GT(1) = 10.0 が出ると次へ行く。

6. LU, LLA, LLB (3I5)

1番目の単位胞の LLA 番目の分子と) の重なりを計算する。
LU 番目 " LLB " と

ただし LU は 14 で指定した単位胞の番号で LU ≤ NLG

LLA, LLB は単位胞中のみ

独立な分子 NCELL 個を並べ

これを UNIT 回くり返す

ときの通し番号である。従って LLA, LLB ≤ NCELL * UNIT

blank カードが来ると次へ行く。

6. blank で JOB 終了。

MOの入力 (FT(NSY(n))FOOIより) は EXTDHの出力と FORMATが一致する。
必要なMOEデータセットの先頭に移動すればよい。

1. MO (I5)

MO ; 係数の数。 MO=MMM があること。

2. CE(12) (12F10.0)

CE ; 係数。

§4. MO係数の変換

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

○ ような対称操作によって分子を移動すると、

(1) S軌道の係数は不変

(2) p軌道は

$$\begin{pmatrix} C_x' \\ C_y' \\ C_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_x \\ C_y \\ C_z \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \leftarrow P_x \\ \leftarrow P_y \\ \leftarrow P_z \end{array}$$

(3) d軌道は、aの非対角項をすべて0として (orthorhombic 以下)

$$\begin{array}{l} C_{xy}' = a_{11} a_{22} C_{xy} \\ C_{yz}' = a_{12} a_{33} C_{yz} \\ C_{z^2}' = C_{z^2} \\ C_{xz}' = a_{33} a_{11} C_{xz} \\ C_{x^2-y^2}' = C_{x^2-y^2} \end{array}$$