



文部科学省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」
第一原理擬ポテンシャルバンド計算プログラム (PHASE)

IT program of MEXT, "Frontier Simulation Software for Industrial Science"
Package for High-performance Atom-level Simulation Environment (PHASE)

東京大学生産技術研究所 ————— 計算科学技術連携研究センター

分類 ナノシミュレーション

キーワード 第一原理計算、擬ポテンシャル

開発者 山崎隆浩、岡本政邦、溝内秀男、
大野隆央

作成年月 2003年 3 月

コード名 PHASE

使用言語 Fortran90

◇第一原理擬ポテンシャルバンド計算プログラム (PHASE)

本プログラム (PHASE) は、電子を内殻 (コア) 電子と価電子に分けて扱い、コア電子は原子のまわりに凍結したものとする。その結果、全電子計算 (FLAPW) と比較して、考えるべき電子数を大幅に削減することができるので、より大きな系の第一原理計算を行うことができ、現状では200原子程度まで計算可能である。この近似を用いたことにより、価電子の感じるポテンシャルはコア電子により遮蔽されたものとなり、とくに擬ポテンシャルと呼ばれる。一般に電子状態は固有状態の和として表すことができるが、PHASE ではその固有状態を平面波で展開する。単位胞が周期的に並ぶ結晶の場合、すべての状態は無数の平面波で完全に展開できることが知られているので、PHASE には平面波の数を増やすことで計算精度を上げることができるというメリットがある。価電子の感じるポテンシャルは価電子密度の汎関数となるので価電子状態はセルフコンシステントに決められる。セルフコンシステントなポテンシャルが定まると、固有状態や全エネルギーなども同時に定まり、また全エネルギーの原子座標による微分をとることで、原子に加わる力の計算も行うことができる。

なお本プログラムは、プログラムソース、使用説明書、および基本的な計算結果などの資料とともに、「フリーソフトウェア」として公開する。

◇プログラムの概要

本プログラムの計算アルゴリズムの基本は、Laasonen¹⁾によるものである。この方法では、Kohn による密度汎関数理論²⁾のもとで Vanderbilt によるウルトラソフト擬ポテンシャル³⁾を用いて平面波基底の第一原理バンド計算を行う。擬ポテンシャルは、ノルム保存の Troullier-Martins 型も扱える。固有状態は最急降下法や共役勾配法などの逐次近似法で解く。この方法は、Payne らによるレビュー記事⁴⁾に詳しく説明されている。逐次近似の速度向上をはかるため Kresse による RMM 法⁵⁾を使うこともできる。密度汎関数法で本質的な精度を決めるのは、交換相関汎関数の形である。本プログラムでは、局所密度近似

(LDA) である PW92型⁶⁾と、電子密度の勾配まで考慮した GGA 近時である PBE96型⁷⁾に対応している。

本プログラムは、JRCAT (Joint Research Center for Atom Technology) で開発された擬ポテンシャル法を使う第一原理分子動力学法プログラムを基としている。この基となるプログラムは Fortran90 を使ってモジュール化され、mpi により並列化されており、次のような特徴を持つ。

- (1) 計算対象となる物理系の構造と計算順序に対応した、演算やデータ構造 (モジュール構造) の階層化。これにより機能の追加などの作業を分担して行うことがより容易になる。
- (2) 局所的な変数、配列や演算の隠蔽。

(3) 入力データ、計算内容に応じた配列の動的な確保。ひとつの実行ファイルであらゆる計算対象に対応することができる (つまり計算対象毎にコンパイルする必要がない)。

- (4) 波動関数に関する並列化軸を k 点とバンド (エネルギー固有値) と二重に持っており、使用できる計算機の数と適合するように、 k 点とバンドの分割を計算の実行時に割り振ることができる。

本プログラムは、他のプログラムとの連携、機能の追加および保守作業の容易化を目的として、下記の点を改良したものである。

- ① 任意の対称性を持った結晶構造をより簡易に計算できること。
- ② 様々な並列計算機上で動作すること。
- ③ スカラ計算機用の最適化を行うこと。

今後も、① 並列化の向上、② 収束性の改良、③ 入出力ファイル形式の簡略化、④ スピン軌道相互作用の考慮、等の改良を継続して進める。また、本プログラム (PHASE) をベースにした

- ① 表面・界面の電子状態解析プログラム
 - ② 表面・界面の実験解析 (STM 像、XPS 像の解析) プログラム
 - ③ 表面・界面の反応過程解析のための反応経路探索プログラム
- についても順次公開していく予定である。

◇関連論文

- 1) Kari Laasonen, Alfred Pasquarello, Roberto Car, Changyol Lee, and David Vanderbilt. "Car-parrinello molecular dynamics with Vanderbilt ultrasoft pseudopotentials." Phys. Rev. B, 47 (16): 10142-10153, 1993.
- 2) P. Hohenberg and W. Kohn. "Inhomogeneous electron gas." Phys. Rev., 136 (3B): B864-B871, 1964.
- 3) David Vanderbilt. "Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism." Phys. Rev. B, 41 (11): 7892-7895, 1990.
- 4) Michael C. Payne, Michael P. Teter, Douglass C. Allan, T.A. Arias, and J.D. Joannopoulos. "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients." Rev. Mod. Phys., 64 (4): 1045-1097, 1992.
- 5) G. Kresse and J. Furthmüller. "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set." Phys. Rev. B, 54 (16): 11169-11186, 1996.
- 6) John P. Perdew and Yue Wang. "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy." Phys. Rev. B, 45 (23): 13244-13249, 1992.
- 7) John P. Perdew, Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. "Generalized gradient approximation made simple." Phys. Rev. Lett., 77 (18): 3865-3868, 1996.