

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」
 第一原理全電子バンド計算プログラム (ABCAP)
 IT Program of MEXT, "Frontier Simulation Software for Industrial Science"
 —All-electron Band-structure CAalculation Package—
 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、全電子
開発者	浜田典昭、別役潔、大野隆央
公開年月	2003年11月
コード名	ABCAP
使用言語	Fortran90

◇第一原理全電子バンド計算プログラム (ABCAP)

本プログラム (ABCAP) は、結晶中のコア電子も含めた全ての電子の電子状態を第一原理計算するプログラムであり、結晶を構成する原子の種類に依存せず精度の高い計算結果が得られることを特徴としてしている。単位胞に含まれる原子の数は30個程度までに限られるが、あらゆる原子種に対して様な結果が得られ、擬ポテンシャル法 (PHASE) の計算結果の妥当性を確認するために用いることもできる。また擬ポテンシャル法が不得手とする d 電子や f 電子を含む系に対しても精度の高い計算を行うことができる。密度汎関数理論に基づく計算では、局所密度近似 (LDA) の他に、LDA+U 法を用いることができる。また、LDA によりバンド構造を計算した後に、GW 近似を用いて電子の自己エネルギーの補正を求めることによって、バンドギャップなどについてより信頼性の高いバンド構造を得ることができる。

内殻電子状態、バンド構造や状態密度などの他に、フェルミ面の作画プログラム、フェルミ面上での速度など、いくつかの物理量の計算プログラムを提供し、また今後のさまざまな物理量を計算するために必要な情報が容易に得られるようなプログラム構成とする。

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2003年9月に公開した。

◇プログラムの概要

Full-Potential Linearized Augmented-Plane-Wave (FLAPW) 法を用いたバンド計算を行う。原子核の周りにマフィンティン (MT) 球と呼ばれる球を設定し、ポテンシャルや電子密度は、MT 球内では球面調和関数と動径関数を用いて、MT 球外では平面波を用いて展開される。内殻電子の波動関数は球対称ポテンシャルに対して解かれる。価電子の波動関数は Takeda-Kubler の LAPW で展開され、一般固有値問題を解くことにより得られる。

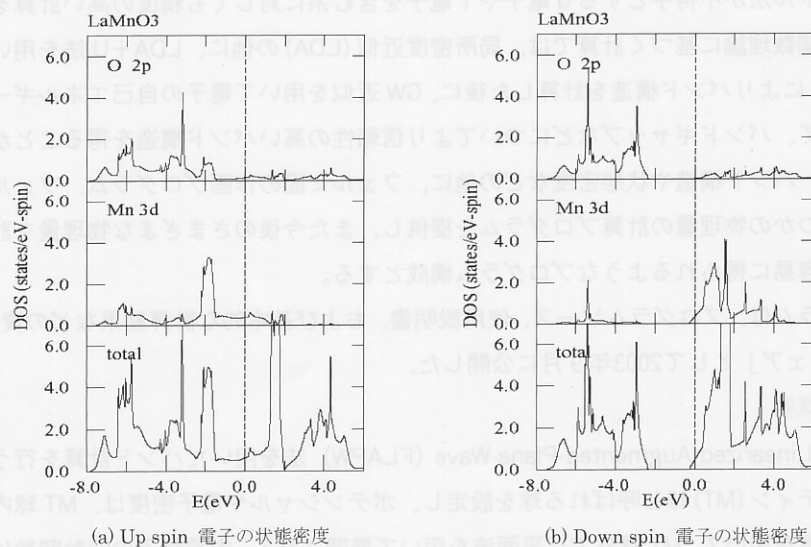
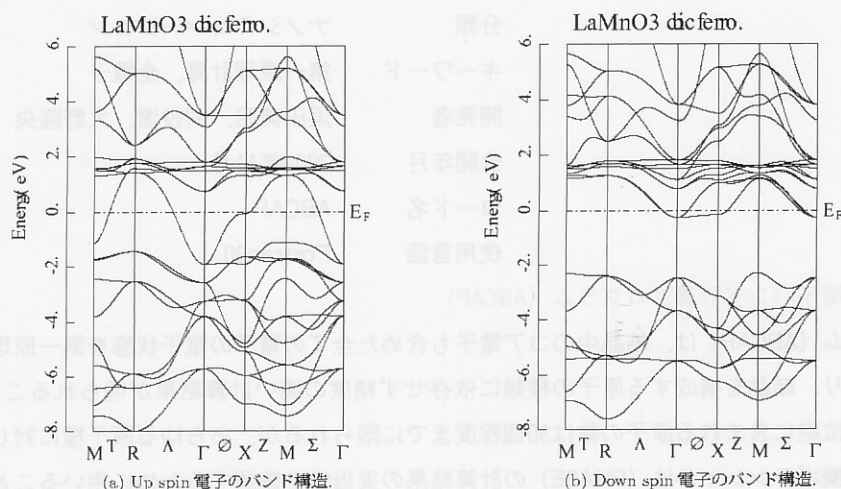
上記手法による ABCAP の特徴を以下に示す。

(1) 局所 (スピン) 密度近似 (Local (Spin) Density Approximation, L(S)DA)

- (2) LDA+U 法を用いることにより強相関系に対しても適用可能
- (3) Takeda-Kubler 型のマフィン・ティン球内の基底関数展開
- (4) 四面体内挿法および energy-broadening 法による k 空間積分
- (5) PostScript (PS) 形式によるバンド構造図、状態密度図、等エネルギー面、動径波動関数の出力

◇計算例

LaMnO₃の強磁性相のバンド構造、状態密度 ABCAP は、全電子に対する電子状態計算を行うため、磁性体に対する電子状態計算にも効果的である。



◇関連論文

1) Y. Nishihara, J. Mizuki, T. Akao, H. Tanaka, M. Uenishi, M. Kimura, T. Okamoto, and N. Hamada, "Self-regeneration of a Pd-perovskite catalyst for automotive emissions control", Nature Vol. 418, pp. 164-167 (2002)