



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	岡本政邦、山本武範、前一樹
公開年月	2003年9月
コード名	CIAO
使用言語	Fortran 90

◇第一原理擬ポテンシャル作成プログラム (CIAO)

CIAO (Code for Investigating Atomic Orbitals) は、密度汎関数理論に基づき、原子の全電子状態を第一原理計算する。そこで得られた全電子ポテンシャルから擬ポテンシャル (PP) を計算する。ここで作成された擬ポテンシャルを、先に公開した「第一原理擬ポテンシャルバンド計算プログラム (PHASE)」や今後公開予定の「量子伝導計算プログラム」等の入力として用いることができる。

CIAO の電子状態計算の枠組みは PHASE に代表される第一原理バンド計算と同じである。CIAO は対象を原子に特化することにより高速計算を可能にしている。また、CIAO は PHASE では扱えないような計算を精度良く行うことができる。例えば、スピン軌道相互作用を含めた計算、相対論的なスピン電子状態の計算、軌道間クーロンエネルギーの計算などが挙げられる。CIAO を同種の公開ソフトと比較した場合、キーワード入力、ゴースト解析、スピン状態、擬原子作成、遷移モーメント計算は CIAO の優れた機能であるといえる。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。

◇ CIAO の特徴

CIAO の一般的な特徴を列挙すると、(1) Fortran 90で記述、(2) 外部ライブラリを必要としない、(3) キーワード形式で入力、(4) 原子の全電子状態計算、(5) 擬ポテンシャルの作成、である。

このうち、「原子の全電子状態計算」の特徴は以下の通りである。

- (1) 密度汎関数理論
- (2) 交換相関汎関数 : LDA (PZ81, PW91)、GGA (PBE96, revPBE)
- (3) 相対論、スカラー相対論、非相対論
- (4) スピン分極
- (5) 擬原子

(6) 解析機能：軌道間クーロンエネルギー、波動関数の極大位置

次に CIAO の主機能である「擬ポテンシャルの作成」の特徴は以下の通りである。

- (1) コアポテンシャル：
 - ・Troullier-Martins ノルム保存+Hamann's GNCPP 法
 - ・Vanderbilt ウルトラソフト PP 法
- (2) 局所ポテンシャル：軌道、BHS、多項式
- (3) 擬波動関数：TM 型、多項式
- (4) コア補正 (PCC)：球 Bessel、多項式
- (5) 入出力形式：入力 (semicore に対応)、出力 (GNCPP1、GNCPP2、CIAOPP)
- (6) 解析機能：波動関数の対数微分、ポテンシャルの Fourier 変換、ノルム保存のゴースト解析、ウルトラソフトのスピンの状態、遷移モーメント

その他、CIAO には以下のような便利なツールが用意されている。

- (1) ppconv：別形式の入力ファイル間の変換 (CIAOPP、GNCPP、PSV)
- (2) makefig_nc：ノルム保存の計算結果の表示 (pdf、ps、eps)
- (3) makefig_us：ウルトラソフトの計算結果の表示 (pdf、ps、eps)

◇計算例

Ce 原子 (価電子配置 $5s^2 5p^6 4f^1 6s^2 5d^1$) のウルトラソフト擬ポテンシャルを *semicore* モードで解き、
 “makefig_us” を用いて作成した図を示す。(左上=作成された擬波動関数、右上= $p1-p1$ 間で作成された
 デフィシット電荷、左下=解き直された波動関数、右下=対数微分) 細線=全電子、太線=PP

