

分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理分子動力学法
開発者	大野隆央、甲賀淳一郎
作成年月	2013年6月
コード名	PHASE
作成言語	Fortran90

PHASE は、密度汎関数理論に基づく第一原理分子動力学プログラムであり、これまで「イノベーション基盤ソフトウェアの研究開発プロジェクト」において開発がすすめられてきた。さらに、新規機能の開発および使い勝手・ロバスト性の向上に向けた開発を行った。主な開発の内容は下記の通りである。

●既存機能の改良

- Davidson ソルバーの改良
- 波動関数ソルバー・電荷密度ミキサーの自動設定機能
- 原子配置更新時における波動関数・電荷密度の補外による高速化
- ベリー位相計算用スクリプトの改良
- 厳密交換相互作用計算の高速化

●新規機能開発

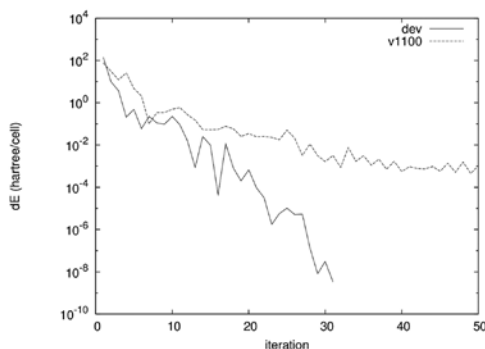
- Effective screening medium 法
- ストレステンソルを利用した単位胞最適化機能
- ノンコリニア磁性とスピン軌道相互作用
- real-time propagation time-dependent DFT 法

以上の開発項目の内、「波動関数ソルバー・電荷密度ミキサーの自動設定機能」と「ストレステンソルを利用した単位胞最適化機能」を紹介する。

◇波動関数ソルバー・電荷密度ミキサーの自動設定機能

PHASE は、波動関数ソルバーとしては $lm+msd$ 法、CG 法、Davidson 法、RMM 法など、また電荷密度混合法としては単純混合法、Broyden による 2 番目の方法、Pulay 法などが搭載されている。以前までのバージョンは、これらの組み合わせを系に応じてユーザー自身が入力パラメーターファイルにおいて設定する必要があり、利用にあたっての大きな障壁となっていた。この点を改善するため、採用

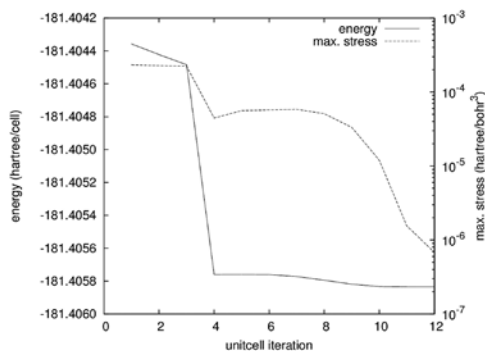
している計算モデルや計算機能に応じて適切な波動関数ソルバー・電荷密度ミキサーの組み合わせを自動的に設定する機能を実装した。この機能によって、これまで効率よく収束させるためには多くのマニュアル設定が必要であった磁性を考慮する計算・DFT+Uを利用する計算・PAW 擬ポテンシャルを利用する計算などを、特別な設定を施すことなく安定かつ高速に計算することが可能になった。本機能の適用例として、入力パラメーターファイルに波動関数ソルバーおよび電荷密度ミキサーの指定がない場合の収束性を公開版 v1100 と開発版とで比較した。採用した系は7層の鉄（100）面であり、磁性を考慮して計算した。結果は下図の通りである。



破線が公開版 v1100 の結果、実線が本機能を利用した結果である。一見して明らかなように、波動関数ソルバーおよび電荷密度ミキサーの指定がない場合の収束性が大幅に改善されている。

◇ストレステンソルを利用した単位胞最適化機能

PHASE には、格子にかかるストレステンソルを計算する機能が備わっているが、本機能はこのストレステンソルを利用して単位胞の最適化を行う。オプションとして、全自由度を最適化するか体積のみを最適化するか、格子が変形する度に基底を作り直すかどうか、などが選べる。また、最適化の手法として、単純な quenched MD 法と準ニュートン法に基づく手法が選べる。本機能の簡単な適用例として、ルチル型 TiO_2 結晶の格子定数をもとめた例を紹介する。下図に、ストレステンソルの最大値と全エネルギーの履歴を示す。実線がエネルギー、破線がストレステンソルの最大値の履歴である。この図より、格子を更新する度に全エネルギーとストレステンソルの最大値が最適化されていくことが分かる。12 回目の更新でストレステンソルの最大値が閾値 (10^{-6} hartree/bohr³) よりも小さくなったので収束したと判定した。この時に得られた TiO_2 の格子定数は、 $a=4.653 \text{ \AA}$ 、 $c=2.972 \text{ \AA}$ であった。



(執筆責任者：大野隆央)