



擬ポテンシャル作成プログラム - CIAO -

Code for Investigating Atomic Orbitals

アドバンスソフト(株) 岡本政邦

擬ポテンシャルのダウンロード

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp>



文部科学省 ITプログラム
戦略的基盤ソフトウェアの
Frontier Simulation Software for Industrial Science

元素周期表

The periodic table of the elements

以下の周期表より、各元素記号を選択するとダウンロード

H																			
Li	Be										B	C	N	O	F	Ne			
Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl	Ar			
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu									
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

Si ケイ素 [Silicon]

「ダウンロード」ボタンをクリックすると、ダウンロードが開始されます。

Si_ldapw91_nc_01.pp

ダウンロード ▾

Si_ggapbe_nc_01.pp

ダウンロード ▾

ページを閉じる [X]

Copyright © Collaborative Research Center of Frontier Simulation Software
for Industrial Science Institute of Industrial Science, University of Tokyo

ページを閉じる [X]

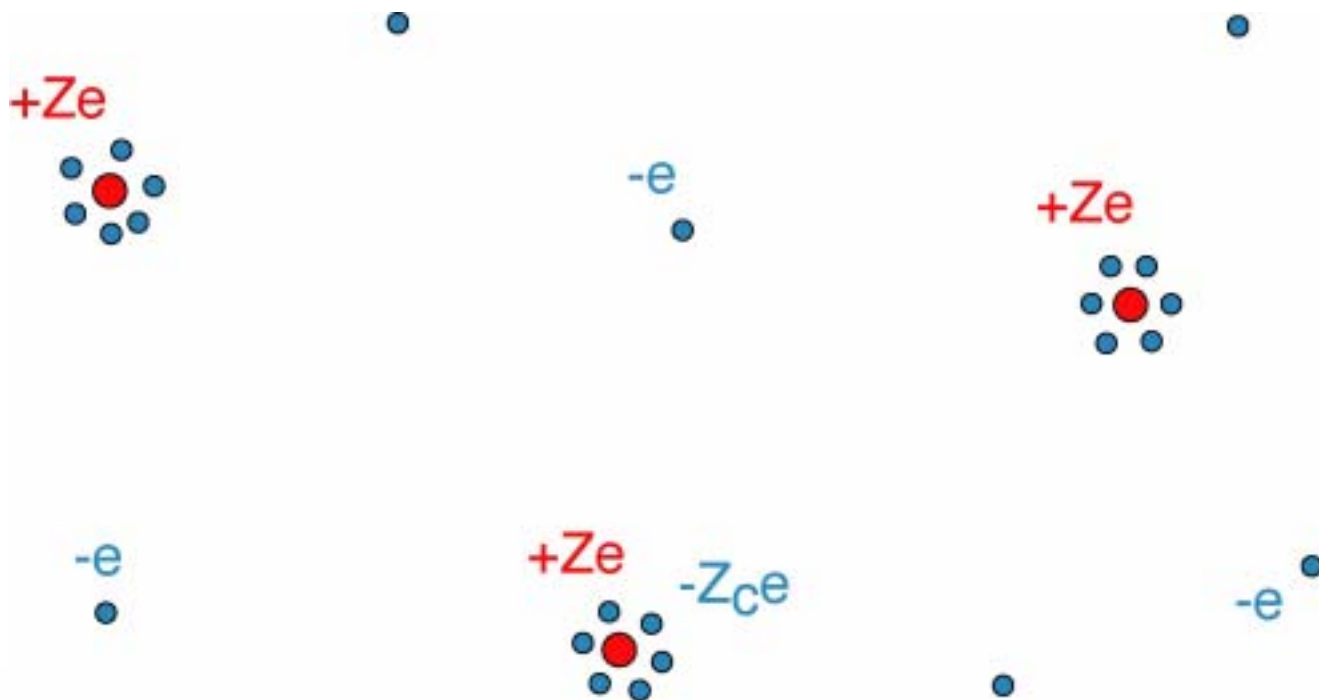
- 擬ポテンシャル法のキーワード
- CIAOの特徴
- 同種公開ソフトの比較
- チュートリアル
 - コンパイルと実行
 - 全電子計算 (水素原子, 炭素原子)
 - ノルム保存擬ポテンシャル作成 (炭素原子)
 - ウルトラソフト擬ポテンシャル作成 (炭素原子)
- 付録: CIAOに特徴的な機能
 - 相対論的スピン状態, 軌道間クーロンエネルギー, 擬原子
 - ゴースト解析, ウルトラソフトのスピン状態
- 今後の開発予定

擬ポテンシャル法のキーワード

- 全電子
- コア電子
- 価電子
- 擬ポテンシャル
- 対数微分
- 非局所ポテンシャル
- 分離型ポテンシャル
- ゴースト
- ノルム保存
- ウルトラソフト
- カットオフ半径
- Deficit電荷
- 参照エネルギー
- 局所ポテンシャル
- 部分コア補正 (PCC)
- Semi-core
- Semi-local
- スカラー相対論
- GGAとLDA
- GNCPP法

全電子

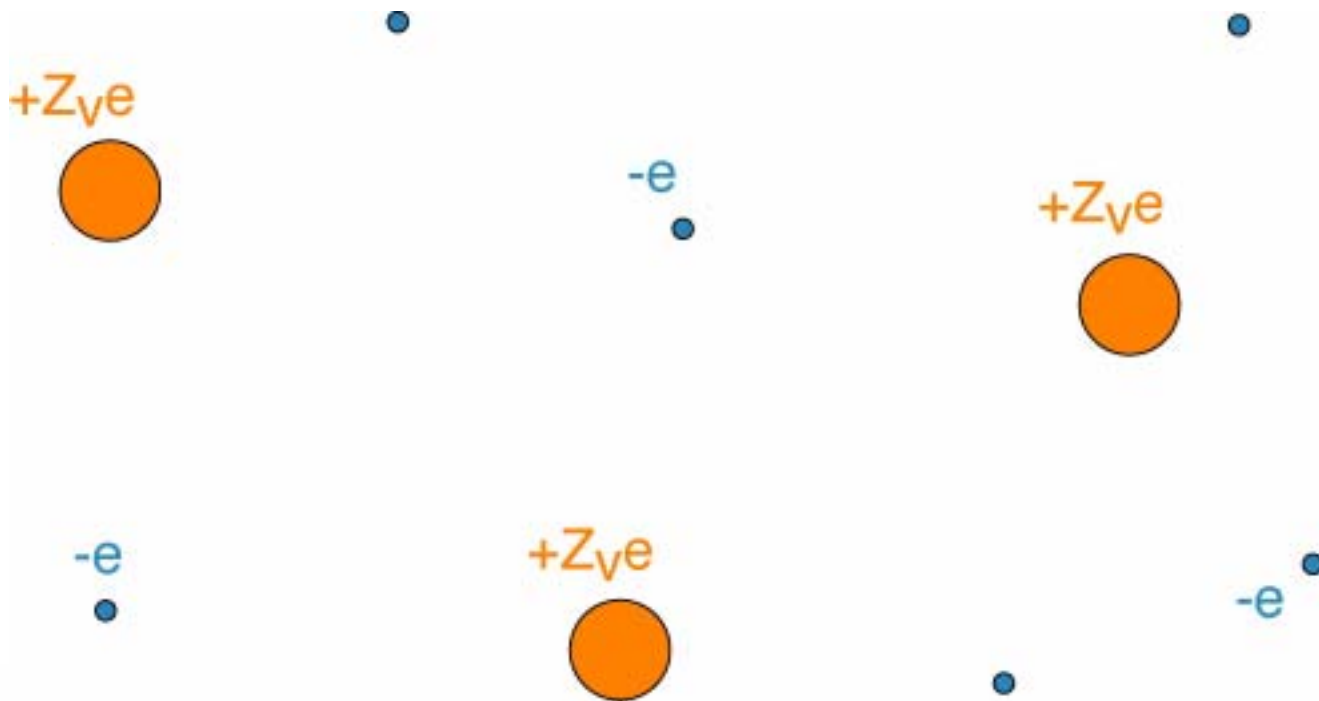
全電子 (AE: All-Electron)



Z : 全電子 Z_c : コア電子(core)

擬ポテンシャル

擬ポテンシャル (PP: Pseudo-Potential)



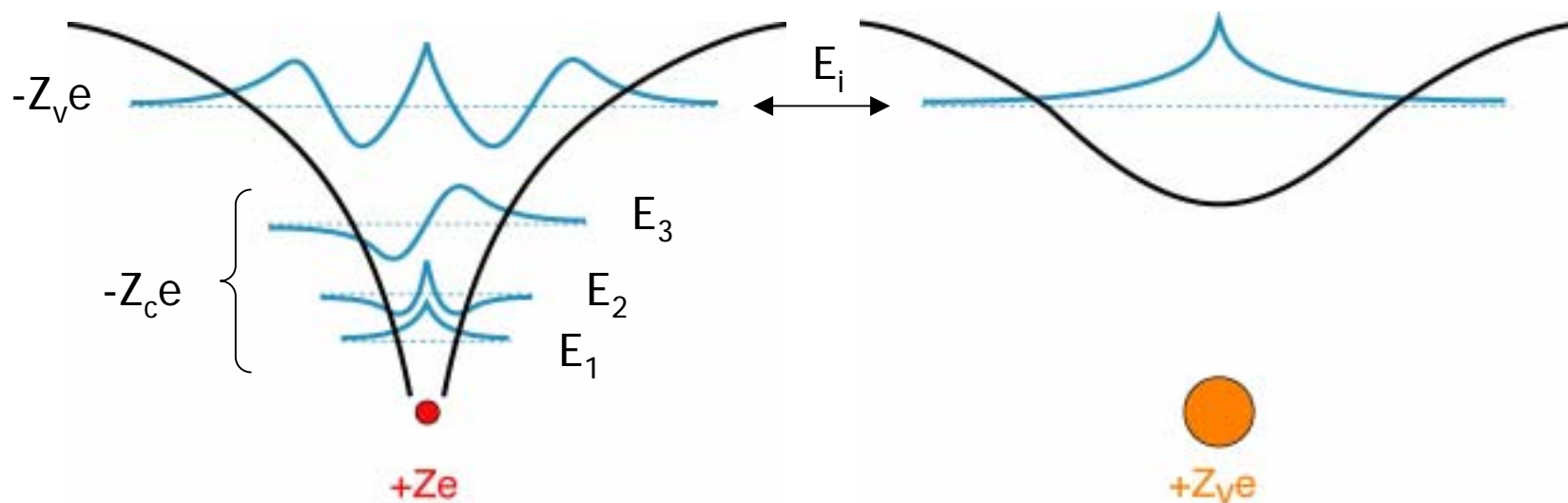
$$Z_v = Z - Z_c$$

Z_v : 価電子 (valence)

全電子と擬ポテンシャル

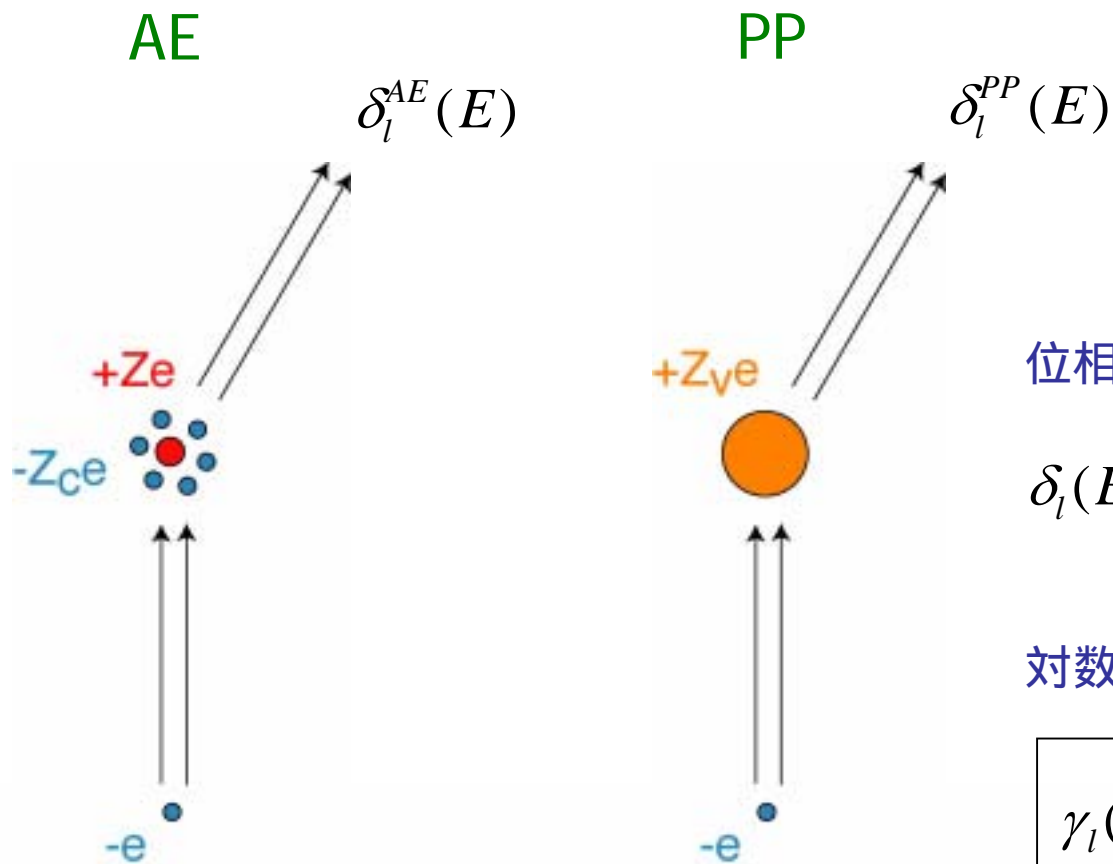
AE

PP



$$[\text{全電子 } Z] = [\text{コア電子(core) } Z_c] + [\text{価電子(valence) } Z_v]$$

波動関数の対数微分



位相のずれ Phase shift

$$\delta_l(E) = \tan^{-1} \frac{kj'_l(kR) - \gamma_l j_l(kR)}{kn'_l(kR) - \gamma_l n_l(kR)}$$

対数微分 Logarithmic derivative

$$\gamma_l(E) \equiv \left[\frac{d \log \psi_l(r, E)}{dr} \right]_{r=R}$$

ゴースト状態

非局所(Non-local)ポテンシャル

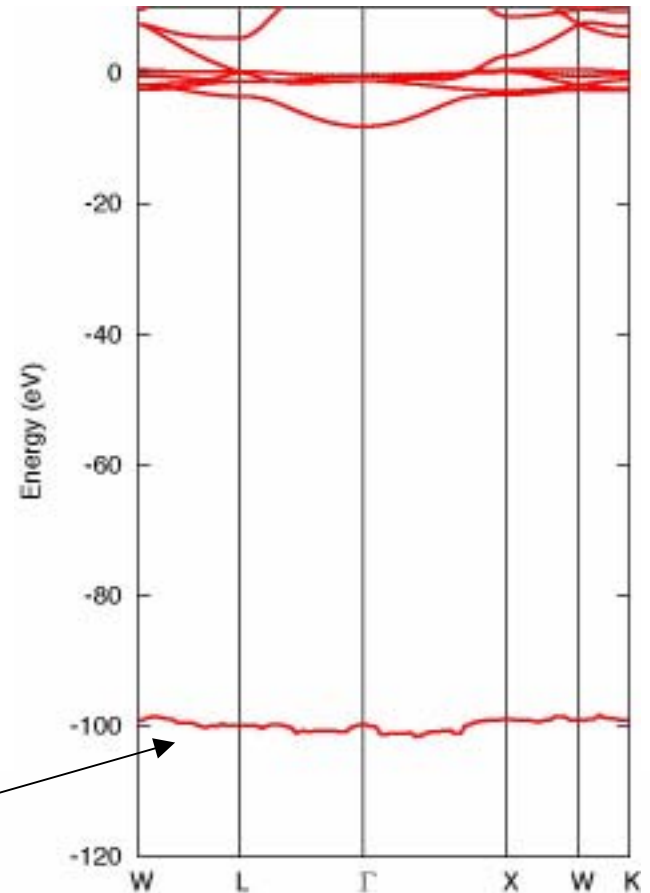
$$V_{NL}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Rightarrow \sum_{nm} \beta_n(\mathbf{r}) D_{nm} \beta_m(\mathbf{r}')$$

分離型(Seperable)ポテンシャル

Wronskian定理の破れ

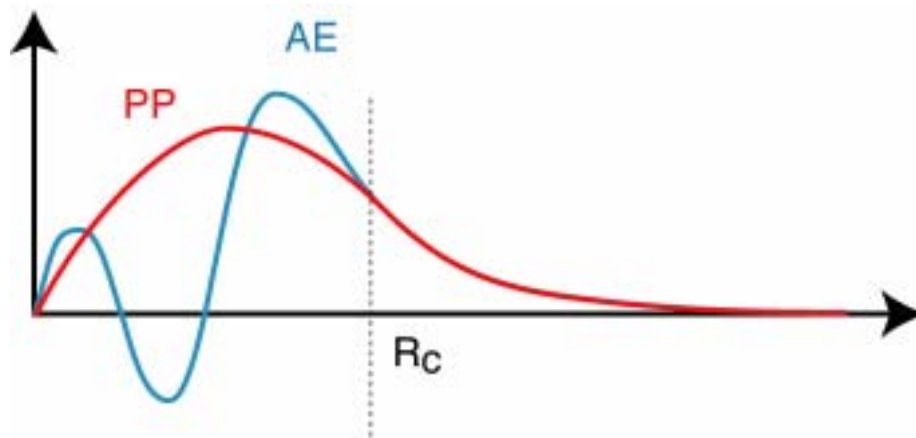
ゴースト発生の危険性

ゴーストの例 (Cu)



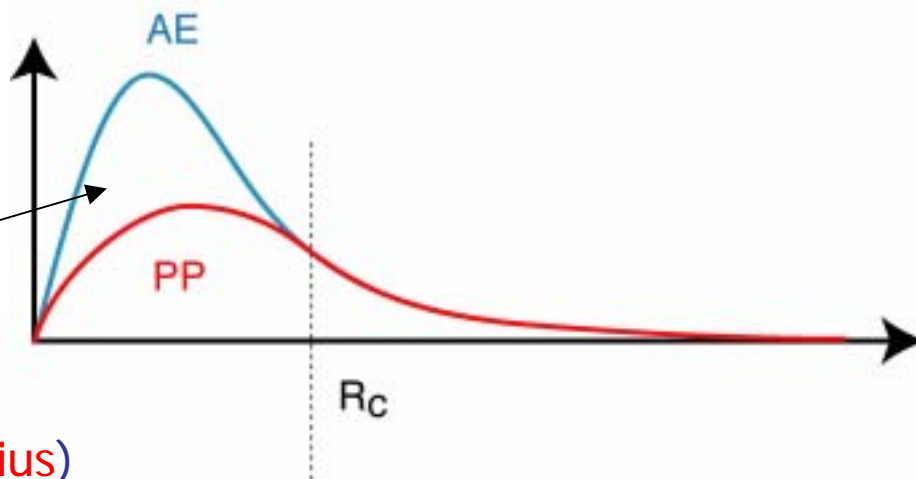
ノルム保存とウルトラソフト

ノルム保存
Norm-conserving



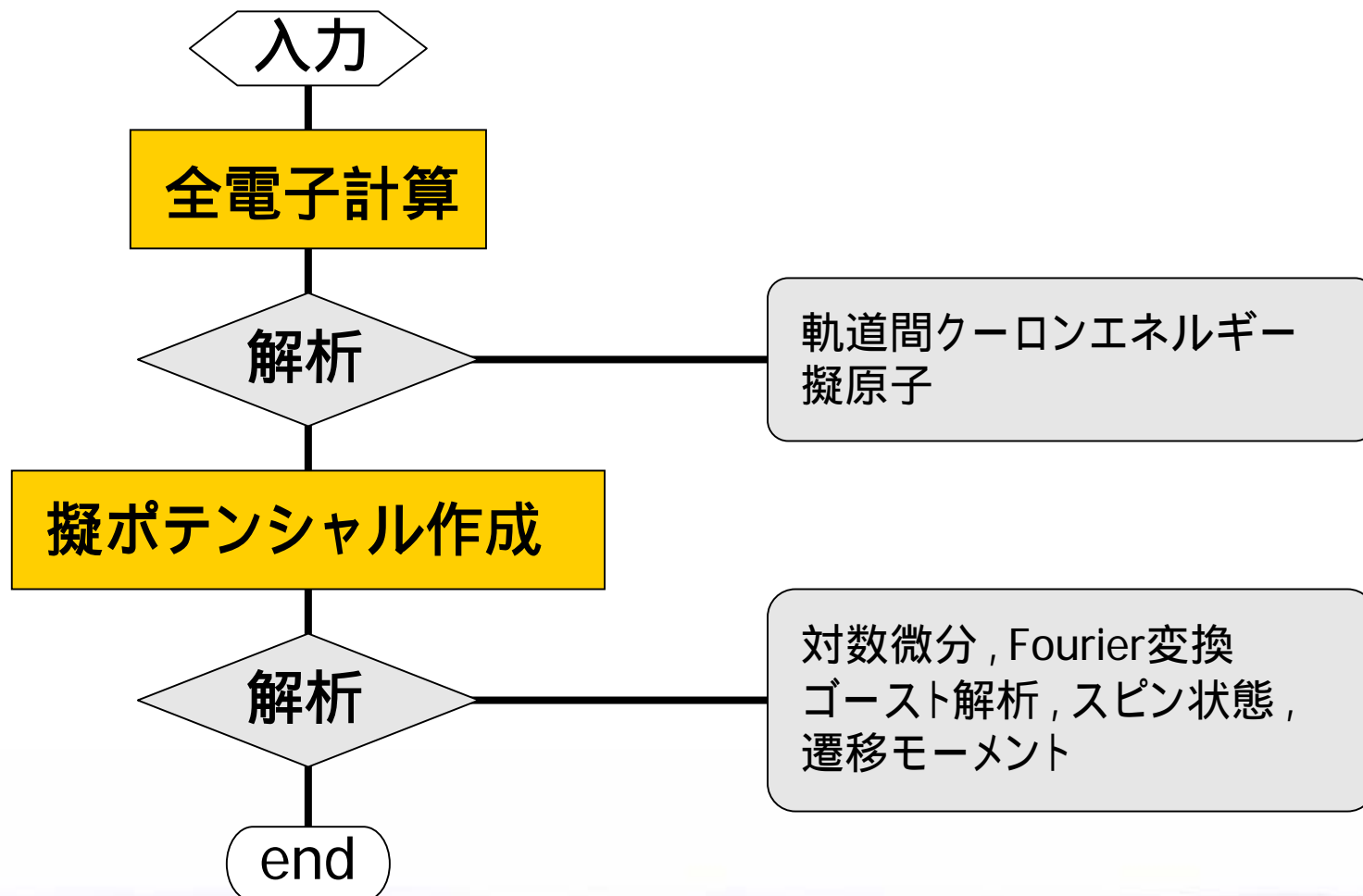
ウルトラソフト
Ultrasoft

Deficit電荷で調整



R_c : カットオフ半径 (Cutoff radius)

CIAOのプログラム構造





CIAOの特徴 (全般)

- Fortran 90で記述
- 数値計算ライブラリを必要としない
- キーワード形式で入力
- 原子の全電子計算
- 擬ポテンシャル作成
- 便利なツール
 - 入力データの変換(CIAOPP, GNCPP, PSV)
 - 計算結果の表示(pdf, ps, eps)

- 密度汎関数理論
- 交換相関汎関数
 - LDA (PZ81, PW91)
 - GGA (PBE96, revPBE)
- 相対論, スカラー相対論, 非相対論
- スピン分極
- 擬原子
- 解析機能
 - 軌道間クーロンエネルギー

CIAOの特徴 (擬ポテンシャル作成)

- コアポテンシャルの取り扱い
 - Troullier-Martinsノルム保存 + Hamann's GNCPP法
 - VanderbiltウルトラソフトPP法
- 局所ポテンシャル: 軌道, BHS, 多項式
- 擬波動関数: TM型, 多項式
- コア補正(PCC): 球Bessel, 多項式
- 入力形式: Semicoreに対応
- 出力形式: GNCPP1, GNCPP2, CIAOPP
- 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
 - 擬ポテンシャルのスピン状態
 - 遷移モーメント

同種公開ソフトの比較

インターネット上で公開されている同種ソフトの比較

ソフト	作者	国名	言語	キーワード入力	スピン	NC	US	PAW	ゴースト解析	擬原子
Atom	Martins	スペイン	f77	×			×	×	×	
Atom	Giannozzi	イタリア	f77	×			×	×	×	×
fhi98PP	Fuchs	ドイツ	f77	×			×	×		×
USPP	Vanderbilt	アメリカ	f77	×	×			×	×	×
AtomPAW	Holzwarth	アメリカ	f90	×	×	×	×		×	×
CIAO	Okamoto	日本	f90					×		

(NC = ノルム保存, US = ウルトラソフト)

表より, CIAOの優れた部分は, f90, キーワード入力, スピン分極, ウルトラソフト擬ポテンシャル, ゴースト解析, 擬原子であるといえる。

表にはないが, CIAOには, 擬ポテンシャルのスピン状態, 軌道間クーロンエネルギーを計算するという他に無い機能も備わっている。

- パッケージ構成
- コンパイルと実行
- 全電子計算
 - 水素原子 (最も簡単な入力例)
 - 炭素原子 (相対論, スカラー相対論, 非相対論, スピン)
- 擬ポテンシャル作成
 - 炭素原子のノルム保存PP作成
 - 炭素原子のウルトラソフトPP作成

パッケージ構成

CIAO_v211.tar.gzの中身

COPYRIGHT	著作権
LICENSE	プログラムのライセンス
LICENSE_J	プログラムのライセンス(日本語)
README	まず始めに読むべき情報
bin	実行ファイルが格納されるフォルダ
examples	入力ファイル例が格納されたフォルダ
outs	作業用のフォルダ
src_CIAO	CIAOのソースファイルが格納されたフォルダ
src_ppconv	ppconvのソースファイルが格納されたフォルダ
templates	入力のテンプレートが格納されたフォルダ
tools	結果表示のツールが格納されたフォルダ
tutorials	チュートリアルが格納されたフォルダ

コンパイル

% make **keyword**

% make install

keyword	コンパイラ
generic	一般のコンパイラ
absoft	Absoft Pro Fortran
intel	Intel Fortran Compiler (ifc)
hitachi	Hitachi SR8000
sgi	SGI LX3700 (efc)

実行

% ../../bin/CIAO input

input ... 入力ファイル (名前は任意)

水素原子の全電子計算

最も簡単な入力ファイル

```
jobname test_01_H_lda
atom_number 1 1.0
electron_config 1 nonrel restricted
  1s 1.0 1
end
```

出力ファイル

```
test_01_H_lda.log
test_01_H_lda.sum
```

計算経過 test_01_H_lda.log

```
momo% grep ETOT test_01_H_lda.log
### ETOT ### etot,dee ... 1 -4.559741022438242E-01 5.440258977561758E-01
### ETOT ### etot,dee ... 2 -4.548824069926662E-01 2.394204508075816E-03
### ETOT ### etot,dee ... 3 -4.530780157476057E-01 3.966720227739287E-03
.....
### ETOT ### etot,dee ... 44 -4.456666588423921E-01 4.359730659496428E-09
### ETOT ### etot,dee ... 45 -4.456666574670491E-01 3.086035221305503E-09
### ETOT ### etot,dee ... 46 -4.456666564932633E-01 2.185009386352460E-09
```

水素原子の全電子計算

計算結果 test_01_H_lda.sum

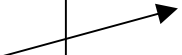
```
eng Energy levels [All-electron]
eng Element ---> H
eng-----
eng  symm      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc   focc
eng-----
eng  1s      -0.2334568514   -6.3526838993   2  1.00000
eng-----
eng Total number of electrons                1.00000
eng-----

etot Total energy [All-electron]
etot-----
etot      Energy (Ha)      Energy (eV)
etot-----
etot Ekin      0.4248634889      11.5611233060
etot Eion     -0.9208204011     -25.0567970139
etot Eh       0.2827679967       7.6945083821
etot Exc     -0.2324777410     -6.3260409505
etot-----
etot Etot     -0.4456666565     -12.1272062763
etot-----
```

炭素原子の全電子計算

入力ファイル

```
input_nonrel_spin  
input_srel_spin  
input_rel_spin
```



```
# Jobname  
jobname test_06_C_lda_rel_spin  
  
# Atom number & Electron configuration  
# (calc_type : nonrel, srel, rel)  
# (spin_type : restricted, polarized)  
atom_number 6 6.0  
electron_config 6 rel polarized manual  
1s 1.0 1.0 1  
2s 1.0 1.0 1  
2p 2.0 0.0 1  
3s 0.0 0.0 0  
3p 0.0 0.0 0  
3d 0.0 0.0 0  
  
# Exchange-correlation potential  
# (xc_type : ldapz81, ldapw91, ggapbe, xlda, none)  
xc_potential ldapw91  
  
# Switches  
sw_calc_hubbard 1  
sw_write_rho 1  
  
# End of input data  
end
```

炭素原子の全電子計算

出力ファイル

```
test_06_C_lda_nonrel_spin.log
test_06_C_lda_nonrel_spin.rho
test_06_C_lda_nonrel_spin.sum
test_06_C_lda_srel_spin.log
test_06_C_lda_srel_spin.rho
test_06_C_lda_srel_spin.sum
test_06_C_lda_rel_spin.log
test_06_C_lda_rel_spin.rho
test_06_C_lda_rel_spin.sum
```

スピン分極した炭素原子の 全エネルギー

	全エネルギー (eV)
非相対論	-1019.563117
スカラー相対論	-1020.004306
相対論	-1020.007400

(スカラー相対論) - (非相対論) = (質量増加に伴うエネルギー)

(相対論) - (スカラー相対論) = (スピン軌道相互作用エネルギー)

炭素原子のノルム保存PP作成

入力ファイル

```
# Jobname
jobname test_06_C_lda_nc

# Atom number & Electron configuration
# (calc_type : nonrel, srel, rel)
# (spin_type : restricted, polarized)
atom_number    6 6.0
electron_config 6 srel restricted
  1s 2.0 1
  2s 2.0 1
  2p 2.0 1
  3s 0.0 0
  3p 0.0 0
  3d 0.0 0

# Exchange-correlation potential
xc_potential ldapw91
```

```
# Pseudopotential
pseudo_potential nc
local_orbital d
orbitals 3
  2s 1.45
  2p 1.45
  3d 1.45
```

```
# Solve PP spin
solve_pp_spin
  spin polarized 2.0
  mix 0.30
```

```
# Switches
sw_calc_hubbard 0
sw_write_rho 1
sw_write_us 1
sw_write_pp 1
sw_write_gncpp 1
sw_write_gncpp2 1
sw_write_sol 1
sw_write_logderi 1
sw_write_fourier 1
```

```
# End of input data
end
```

炭素原子のノルム保存PP作成

出力ファイル

```
test_06_C_lda_nc.log  
test_06_C_lda_nc.sum  
test_06_C_lda_nc.gncpp  
test_06_C_lda_nc.gncpp2  
test_06_C_lda_nc.ft  
test_06_C_lda_nc.ldr  
test_06_C_lda_nc.pp  
test_06_C_lda_nc.rho  
test_06_C_lda_nc.sol  
test_06_C_lda_nc.us
```

GNCPP形式, GNCPP2形式の
擬ポテンシャル

作成された擬ポテンシャルの
解析データ

炭素原子のノルム保存PP作成

test_06_C_lda_nc.sum

分離型擬ポテンシャルを解き直した電子状態

```
eng-----  
eng  symm  s      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc   focc  
eng-----  
eng  2s    +    -0.5331822223   -14.5086258946  1  1.00000  
eng  2s    -    -0.4286096698   -11.6630620721  1  1.00000  
eng  2p    +    -0.2291098864    -6.2343969683  3  2.00000  
eng  2p    -    -0.1327984078    -3.6136283940  3  0.00000  
eng-----  
eng  Number of electrons (+)                      3.00000  
eng              (-)                            1.00000  
eng-----
```

```
etot-----  
etot      Energy (Ha)      Energy (eV)  
etot-----  
etot  Ekin      3.2657486778      88.8655394910  
etot  Eion[NL]   0.4909707270      13.3599927093  
etot  Eion[LOC] -12.1367327648    -330.2572889711  
etot  Eh        4.4212258888     120.3076729353  
etot  Exc       -1.4370418554    -39.1038969456  
etot  Epcc      0.0000000000      0.0000000000  
etot-----  
etot  Etot      -5.3958293265    -146.8279807811  
etot  Etot*     -5.3958280015    -146.8279447262  
etot-----
```

炭素原子のノルム保存PP作成

test_06_C_lda_nc.sum

ゴースト状態の解析

Kleinman-Bylander energies : E[KB](l,loc)

	s	p	d
s	0.000000	-4.924991	-4.234269
p	5.175955	0.000000	-1.505620
d	3.431247	-1.727463	0.000000
present	3.431247	-1.727463	0.000000

Kleinman-Bylander local energy levels : Eloc[KB](i,l)

	s	p	d
local-1	-1.599444	-0.121257	0.000000
local-2	-0.055272	0.000000	0.000000
E[KB]	+	-	0
eigen	-0.501235	-0.199029	0.000000
ghost	none	none	none

```
oooooooooooooooooooooooooooooooooooo  
ooo No ghost states exist ooo  
oooooooooooooooooooooooooooooooooooo
```

炭素原子のノルム保存PP作成

擬ポテンシャルデータの表示

入力

```
test_06_C_lda_nc.ft  
test_06_C_lda_nc.ldr  
test_06_C_lda_nc.pp  
test_06_C_lda_nc.rho  
test_06_C_lda_nc.sol  
test_06_C_lda_nc.us
```

gnuplot
latex
が必要！

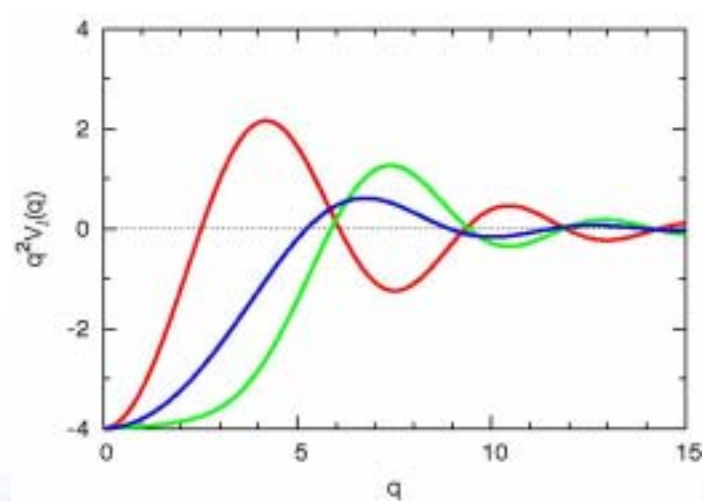
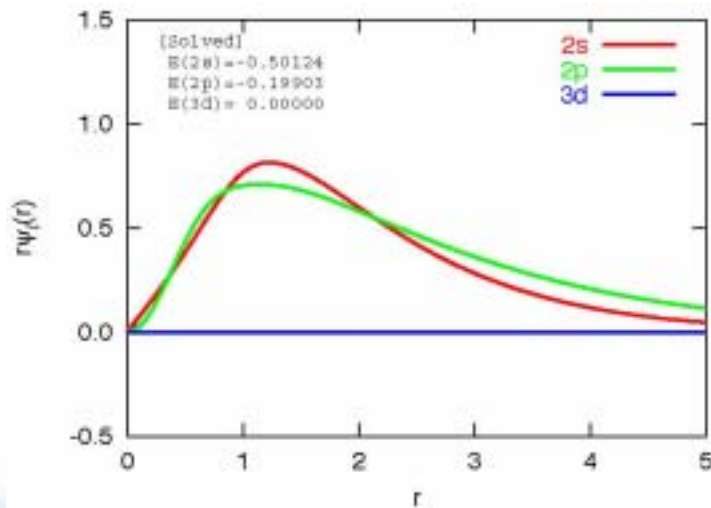
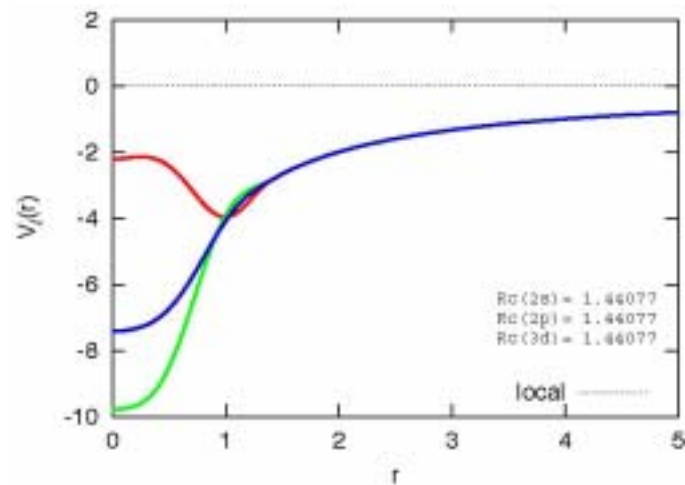
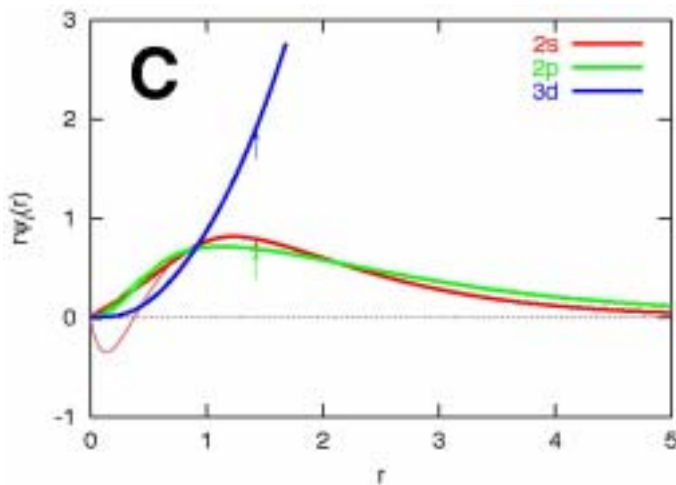
スクリプト実行

```
% ../../../../tools/makefig_nc test_06_C_lda_nc
```

自動生成されるファイル

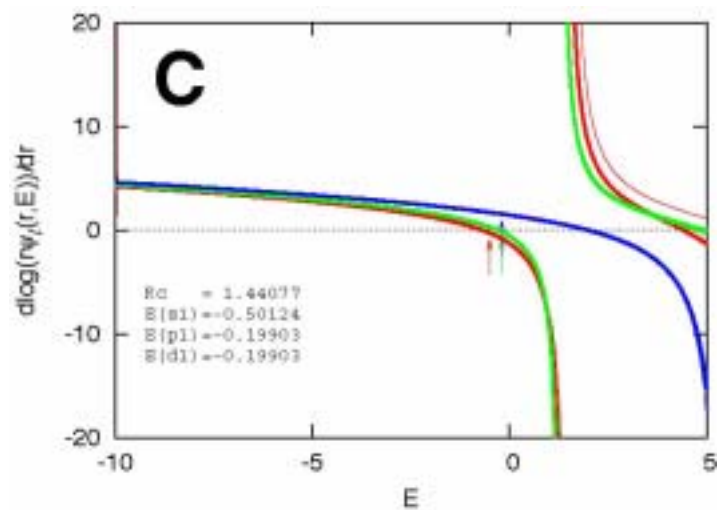
```
test_06_C_lda_nc_fig.pdf  
test_06_C_lda_nc_fig.ps  
test_06_C_lda_nc_ft.eps  
test_06_C_lda_nc_ldr.eps  
test_06_C_lda_nc_ldr_std.eps  
test_06_C_lda_nc_pp_rho.eps  
test_06_C_lda_nc_pp_rphi.eps  
test_06_C_lda_nc_pp_vps.eps  
test_06_C_lda_nc_sol_rho.eps  
test_06_C_lda_nc_sol_rphi.eps  
test_06_C_lda_nc_sol_vloc.eps  
test_06_C_lda_nc_us_gbeta.eps  
test_06_C_lda_nc_us_gphi.eps  
test_06_C_lda_nc_us_rbeta.eps  
test_06_C_lda_nc_us_rphi.eps
```

炭素原子のノルム保存PP作成

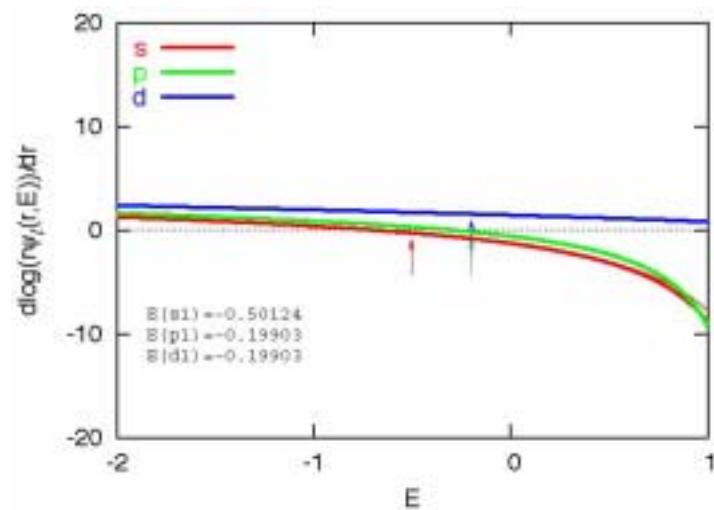


炭素原子のノルム保存PP作成

対数微分

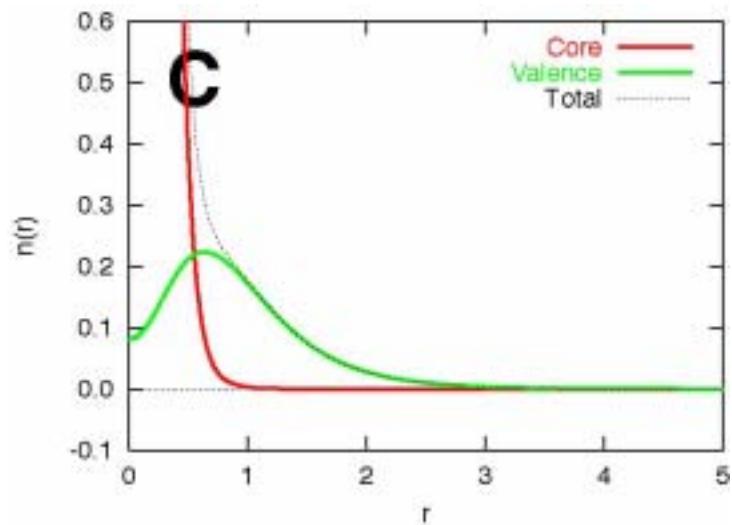


対数微分

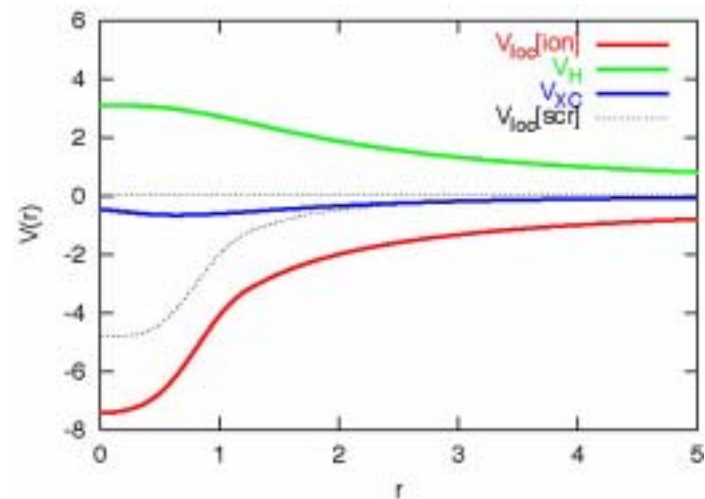


炭素原子のノルム保存PP作成

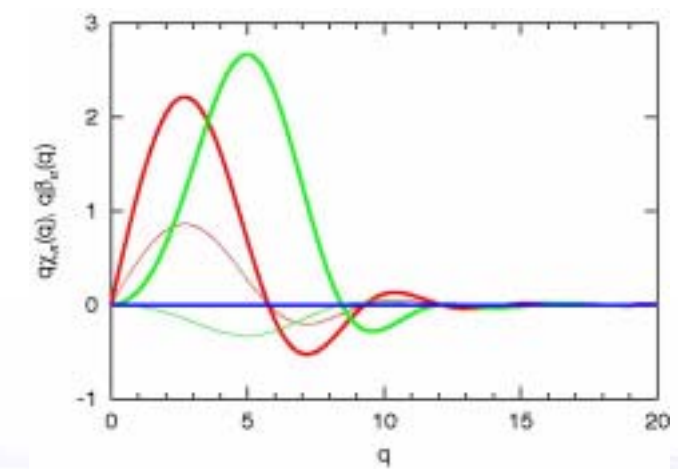
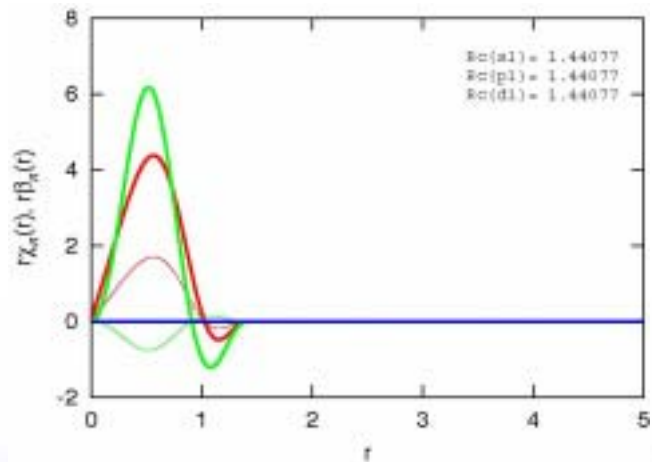
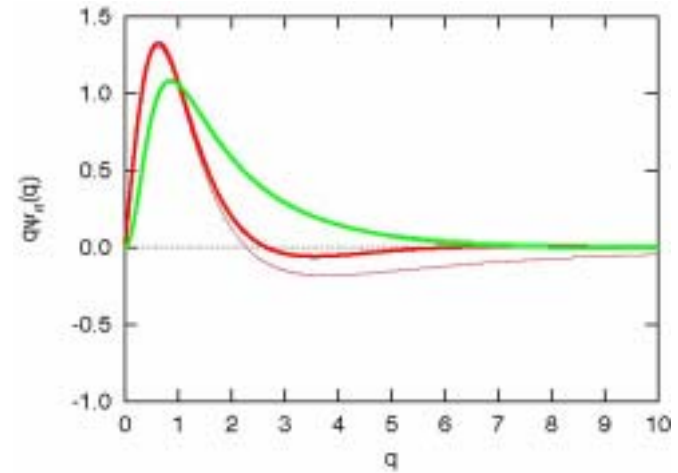
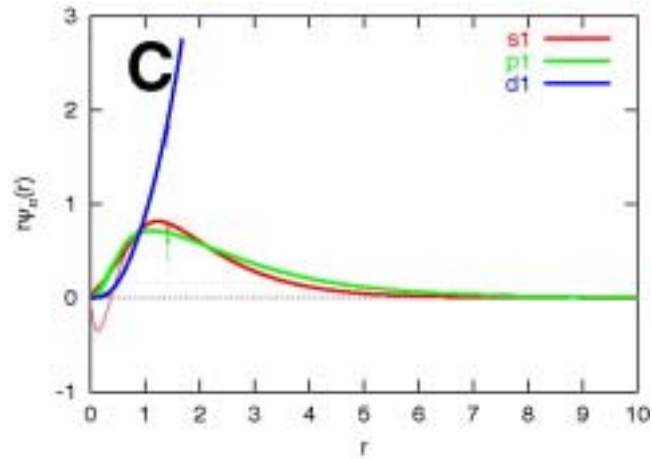
電子密度



ポテンシャル



炭素原子のノルム保存PP作成



炭素原子のウルトラソフトPP作成

入力ファイル (NCと異なる部分)

```
# Jobname
jobname test_06_C_lda_us

# Pseudopotential
pseudo_potential general
local_orbital d
orbitals 3
2s us 2
1.30 0.00 0.8
1.30 0.30 0.8
2p us 2
1.35 0.00 0.8
1.35 -0.30 0.8
3d nc 1
1.40 0.00 0.8

phi_np 5
phi_gmesh 600 4.00 40.0
qps_np 5
qps_gmesh 500 14.00 40.0
```

局所ポテンシャル

波動関数のカットオフ半径
参照エネルギー
Deficit電荷のカットオフ半径

波動関数とDeficit電荷の
最適化のカットオフ

炭素原子のウルトラソフトPP作成

出力データ

```
test_06_C_lda_us.log  
test_06_C_lda_us.sum  
test_06_C_lda_us.gncpp  
test_06_C_lda_us.gncpp2
```

```
test_06_C_lda_us.ldr  
test_06_C_lda_us.rho  
test_06_C_lda_us.sol  
test_06_C_lda_us.us  
test_06_C_lda_us.qps
```

擬ポテンシャルデータの表示

スクリプト実行

```
% ../../../../tools/makefig_us test_06_C_lda_us
```

炭素原子のウルトラソフトPP作成

自動生成されるファイル

test_06_C_lda_us_fig.pdf

test_06_C_lda_us_fig.ps

test_06_C_lda_us_ldr.eps

test_06_C_lda_us_ldr_std.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_p1p1.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_p1p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_p2p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1p1.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1s1.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s1s2.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s2p1.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s2p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_ggq_s2s2.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_p1p1.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_p1p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_p2p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1p1.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1s1.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s1s2.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s2p1.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s2p2.eps

test_06_C_lda_us_qps_rrq_s2s2.eps

test_06_C_lda_us_sol_rho.eps

test_06_C_lda_us_sol_rphi.eps

test_06_C_lda_us_sol_vloc.eps

test_06_C_lda_us_us_gbeta.eps

test_06_C_lda_us_us_gbeta_d.eps

test_06_C_lda_us_us_gbeta_p.eps

test_06_C_lda_us_us_gbeta_s.eps

test_06_C_lda_us_us_gphi.eps

test_06_C_lda_us_us_gphi_d.eps

test_06_C_lda_us_us_gphi_p.eps

test_06_C_lda_us_us_gphi_s.eps

test_06_C_lda_us_us_rbeta.eps

test_06_C_lda_us_us_rbeta_d.eps

test_06_C_lda_us_us_rbeta_p.eps

test_06_C_lda_us_us_rbeta_s.eps

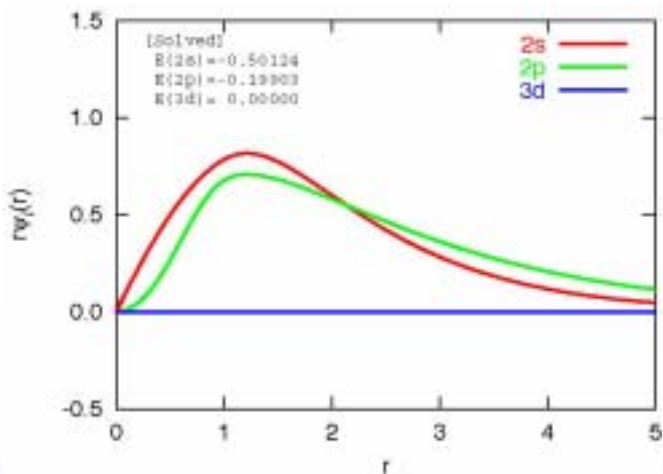
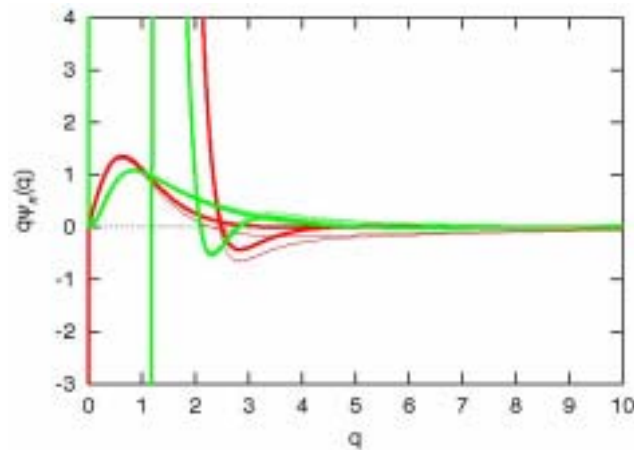
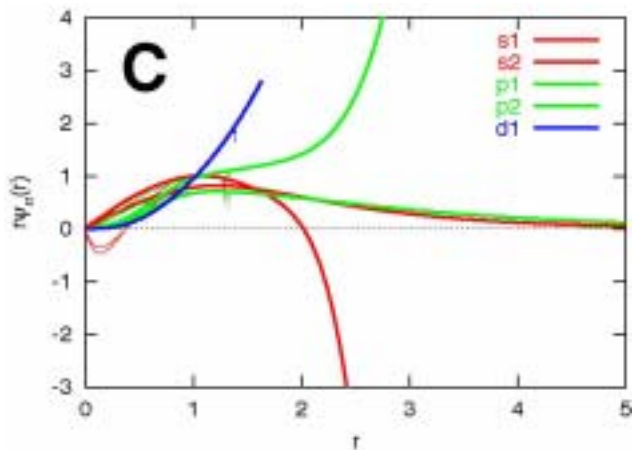
test_06_C_lda_us_us_rphi.eps

test_06_C_lda_us_us_rphi_d.eps

test_06_C_lda_us_us_rphi_p.eps

test_06_C_lda_us_us_rphi_s.eps

炭素原子のウルトラソフトPP作成

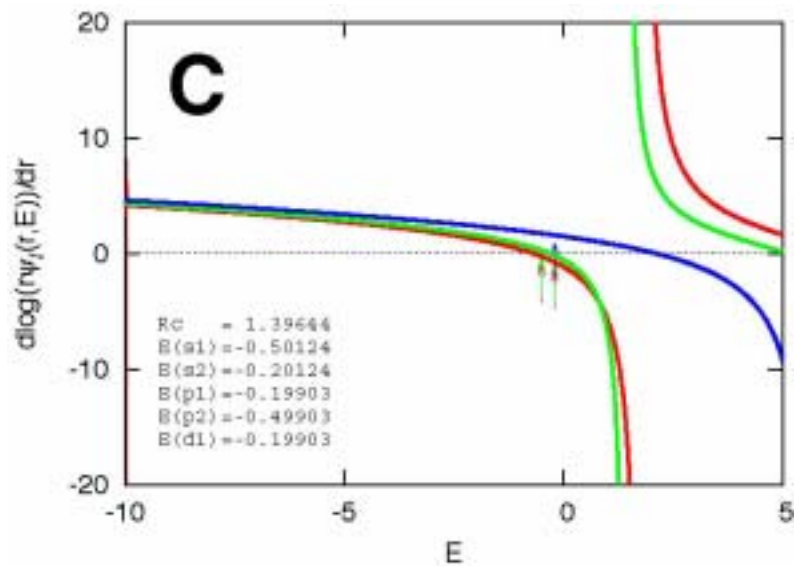


擬ポテンシャル作成時の
波動関数

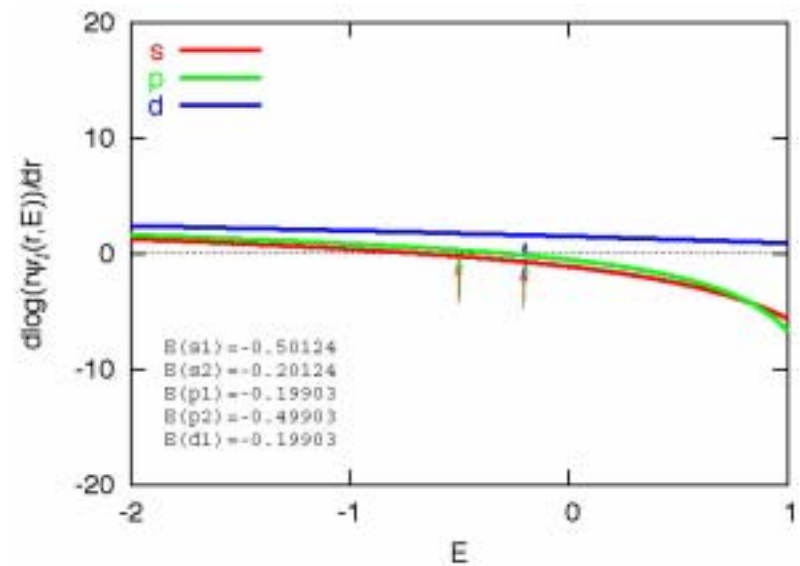
擬ポテンシャルから
解き直した電子準位と
その波動関数

炭素原子のウルトラソフトPP作成

対数微分

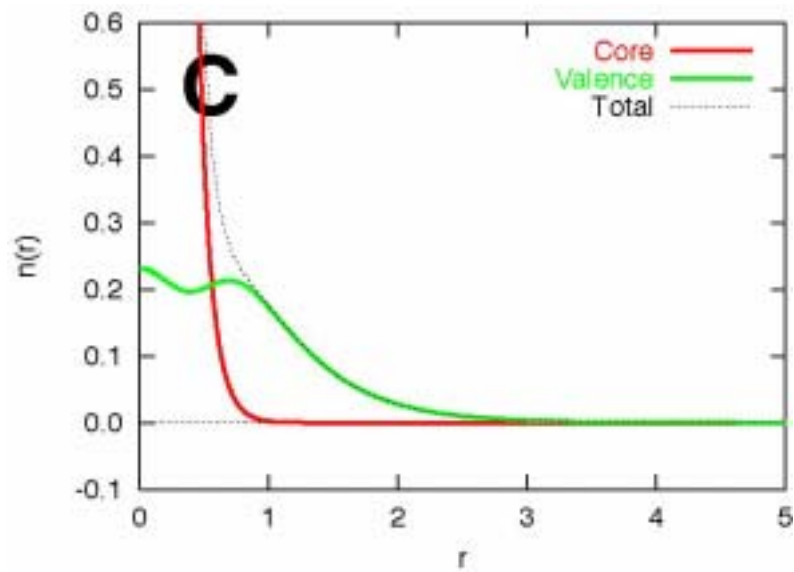


対数微分

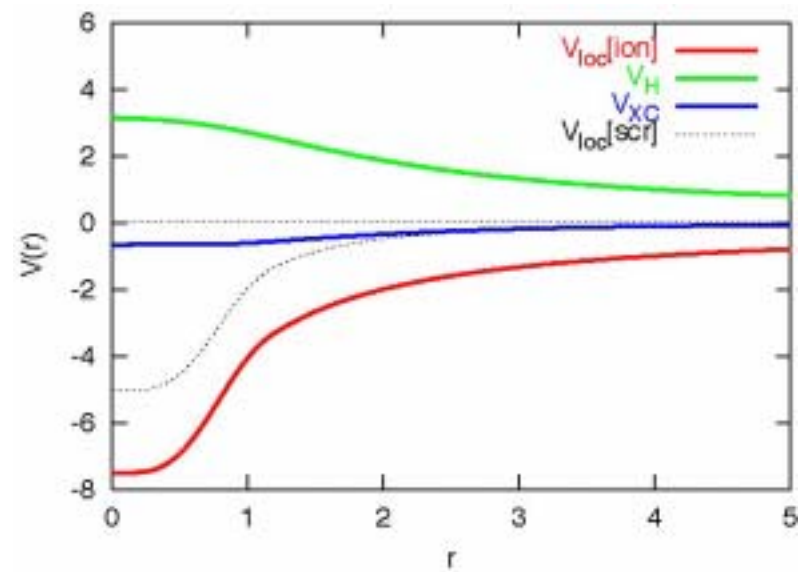


炭素原子のウルトラソフトPP作成

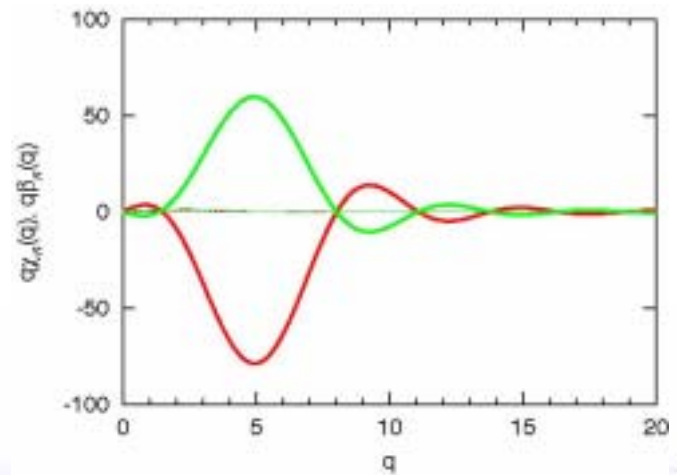
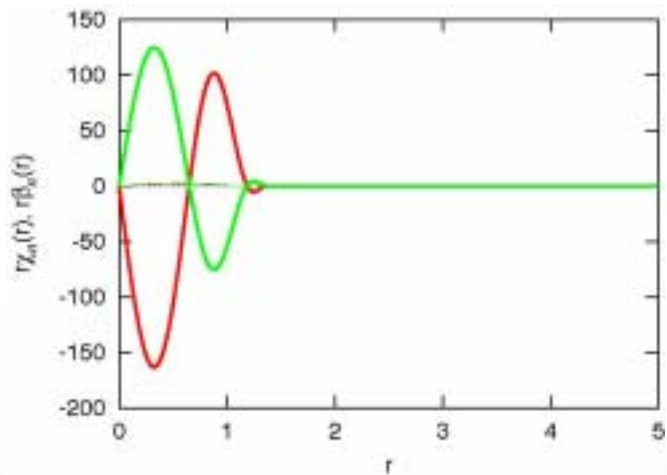
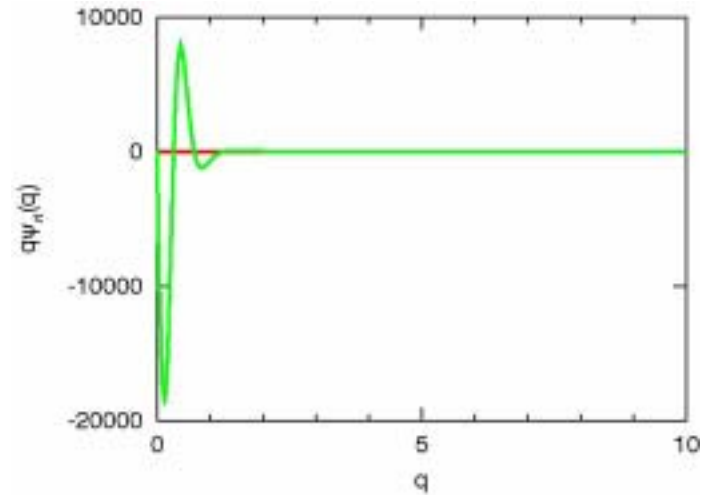
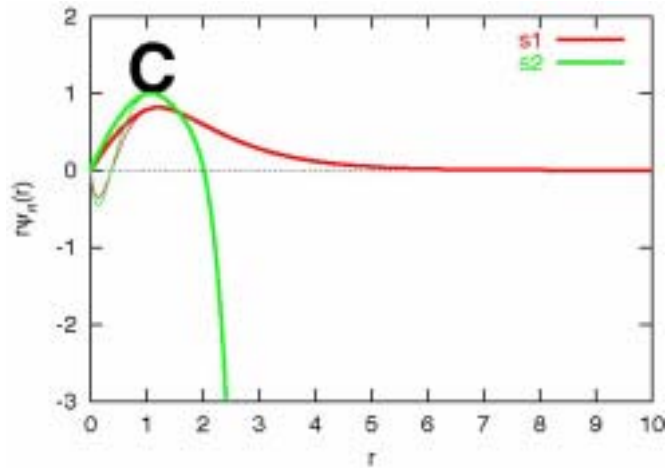
電子密度



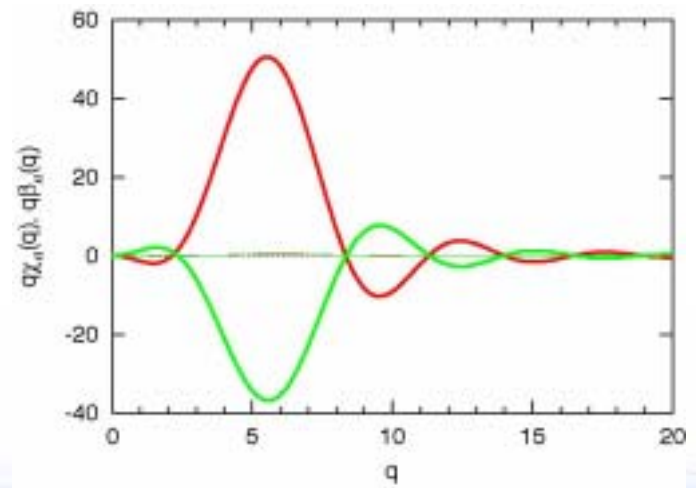
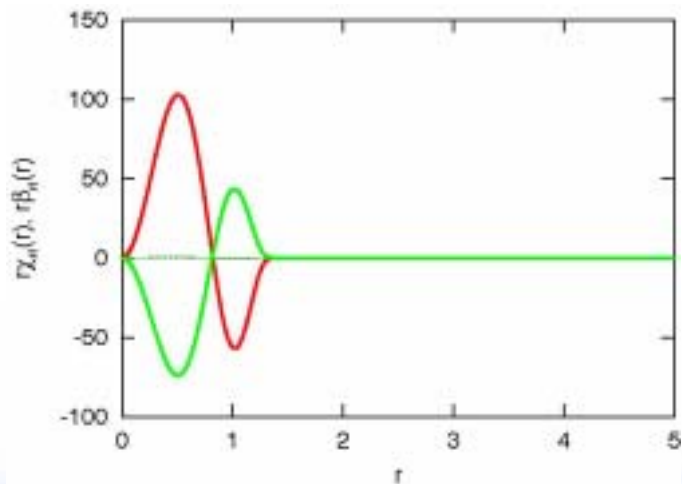
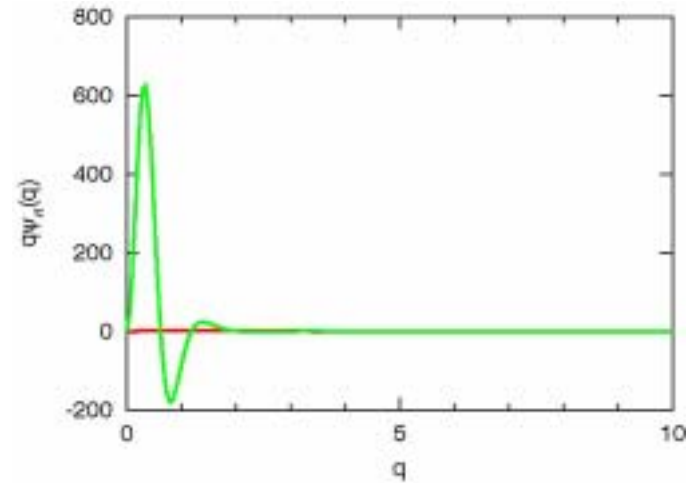
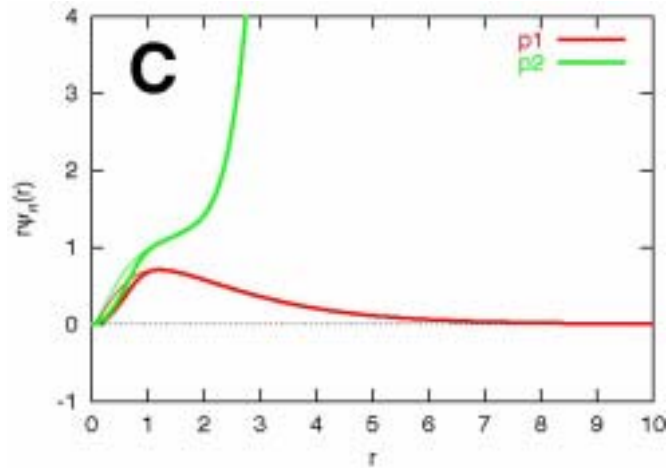
ポテンシャル



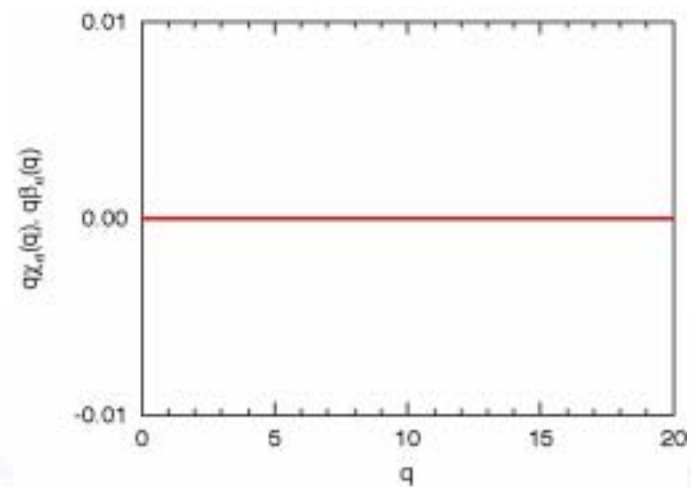
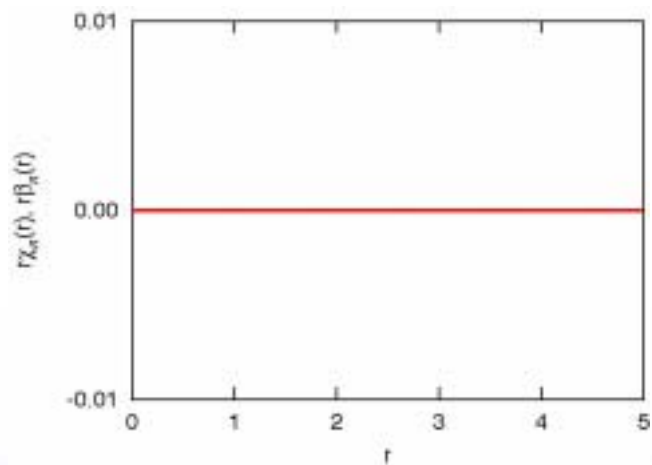
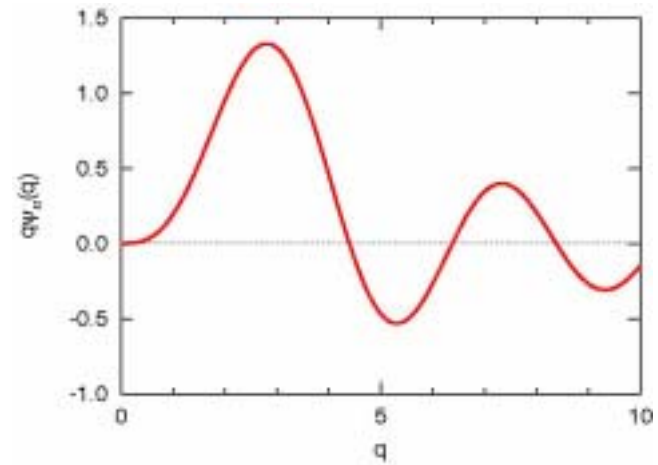
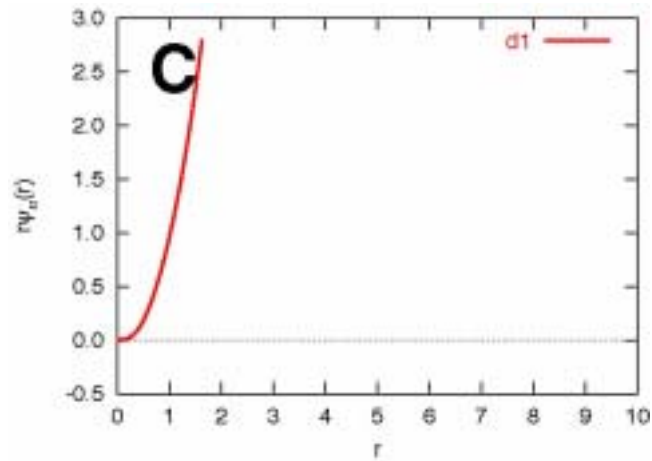
炭素原子のウルトラソフトPP作成



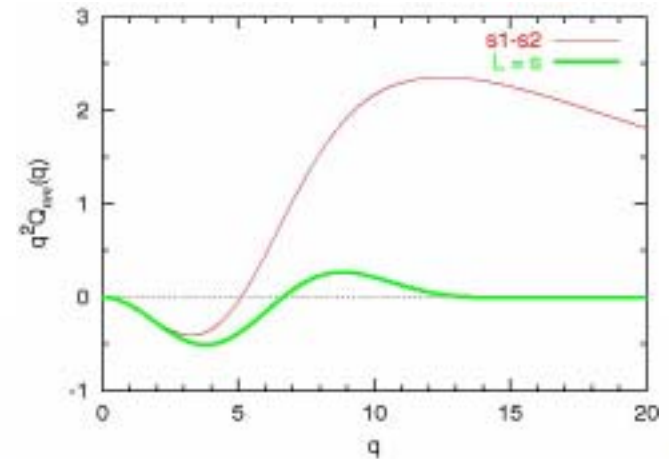
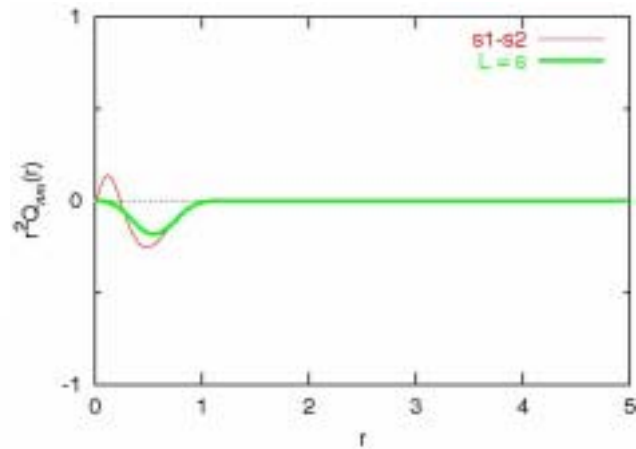
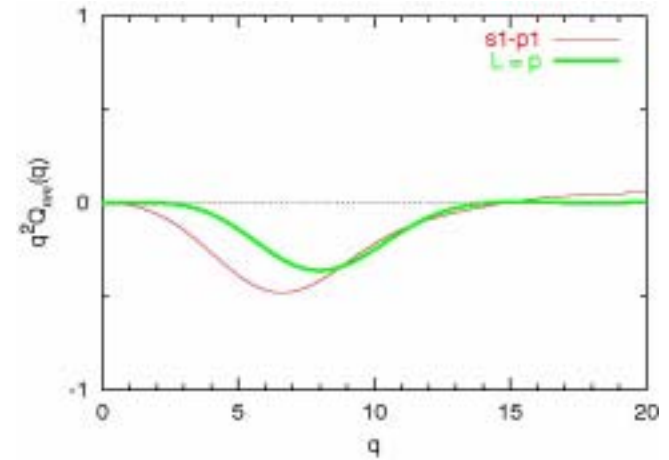
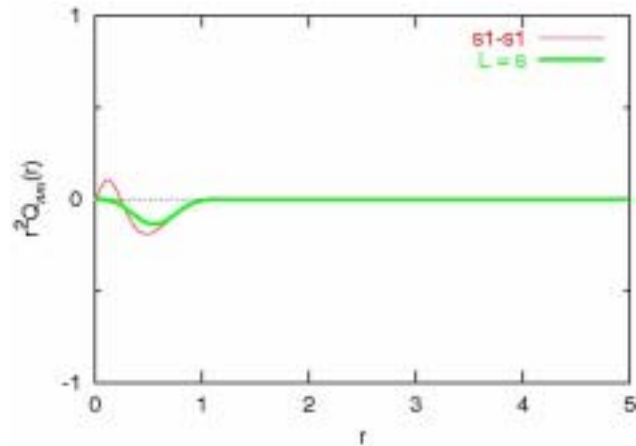
炭素原子のウルトラソフトPP作成



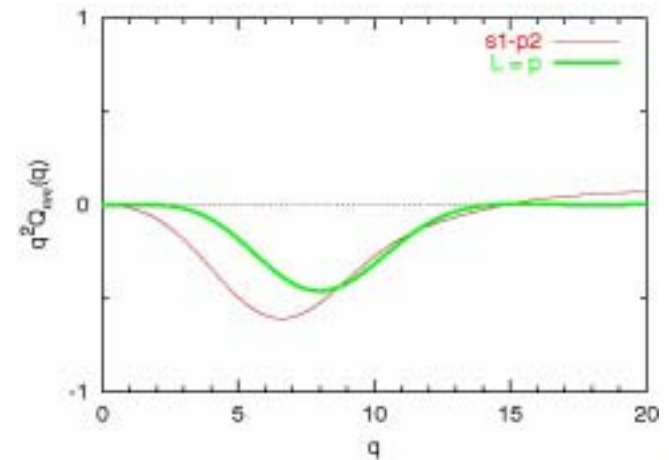
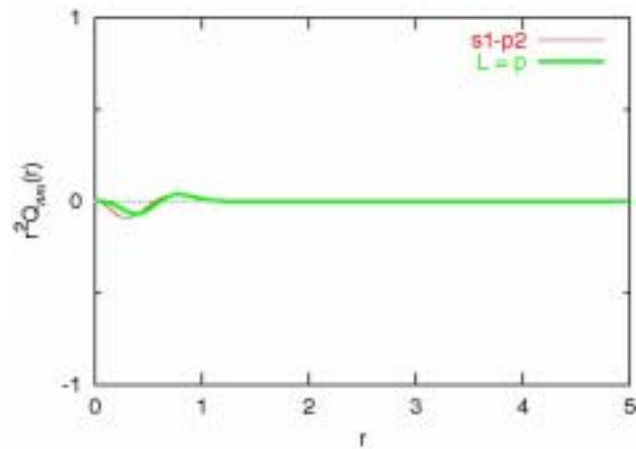
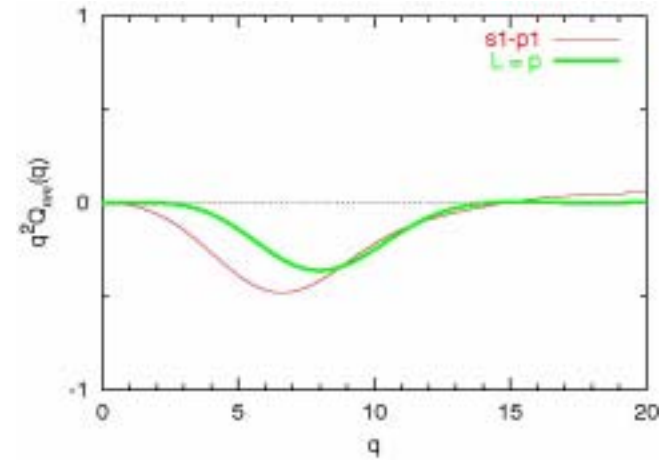
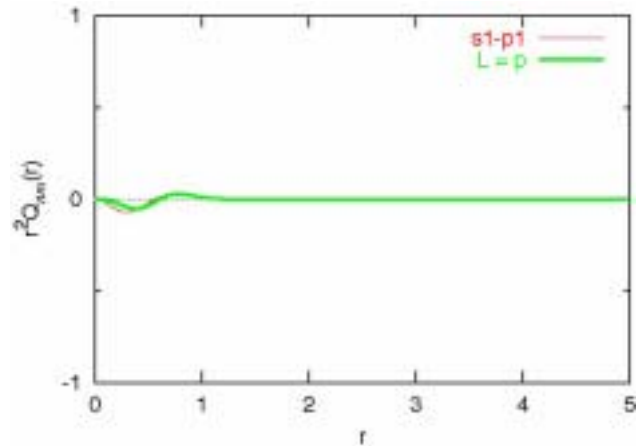
炭素原子のウルトラソフトPP作成



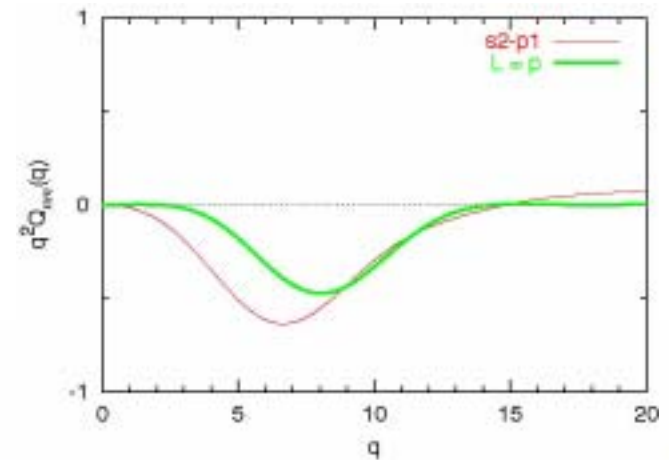
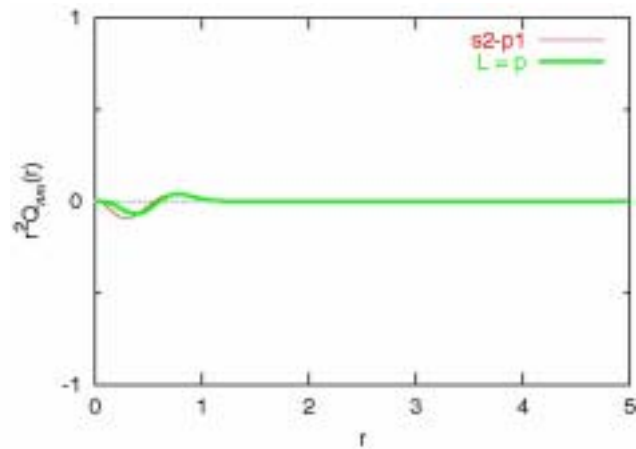
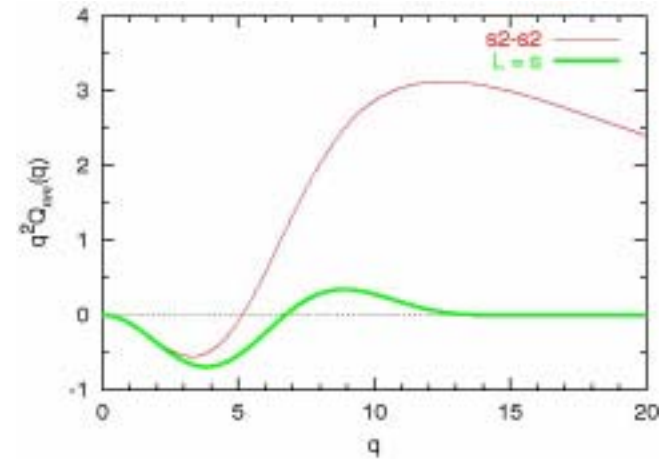
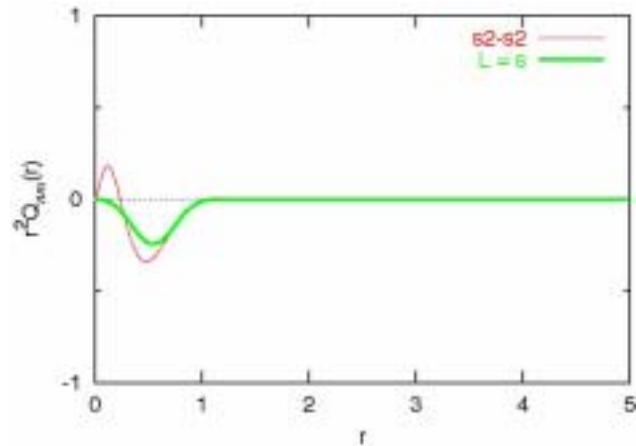
炭素原子のウルトラソフトPP作成



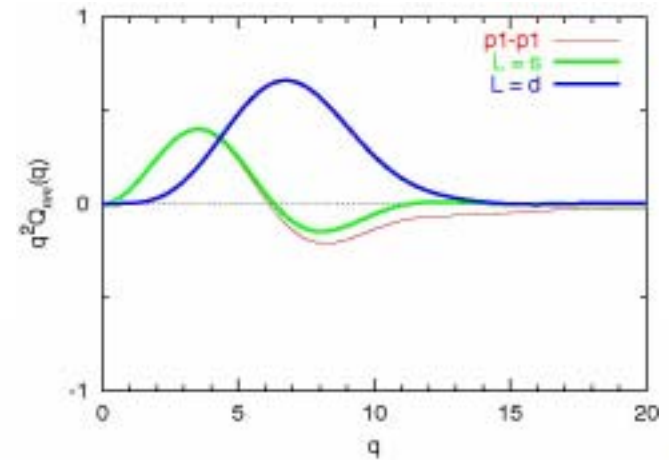
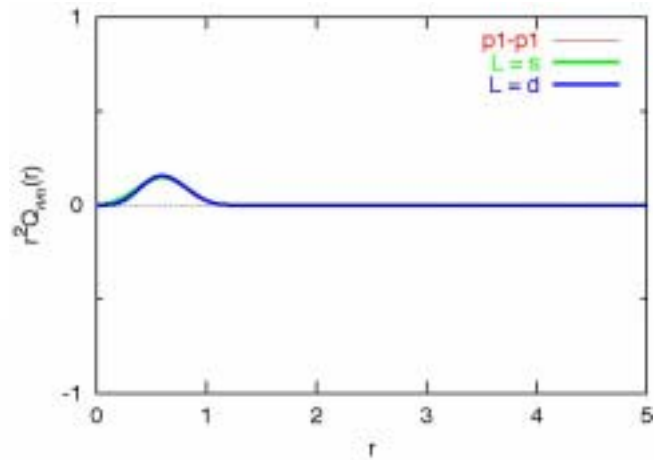
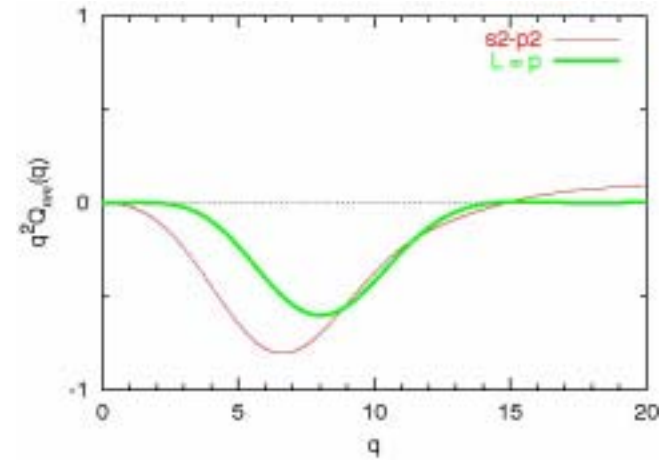
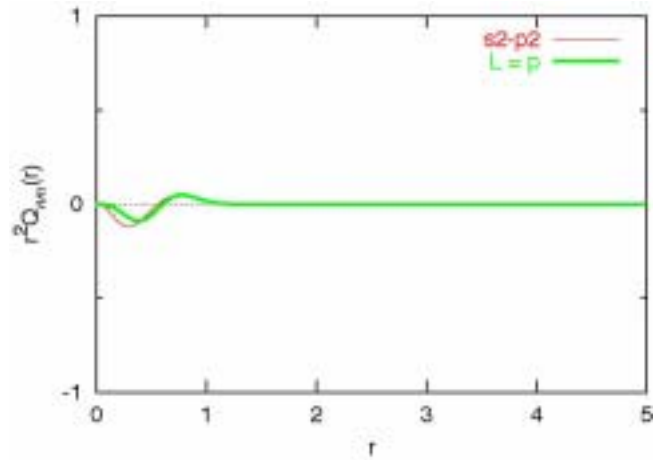
炭素原子のウルトラソフトPP作成



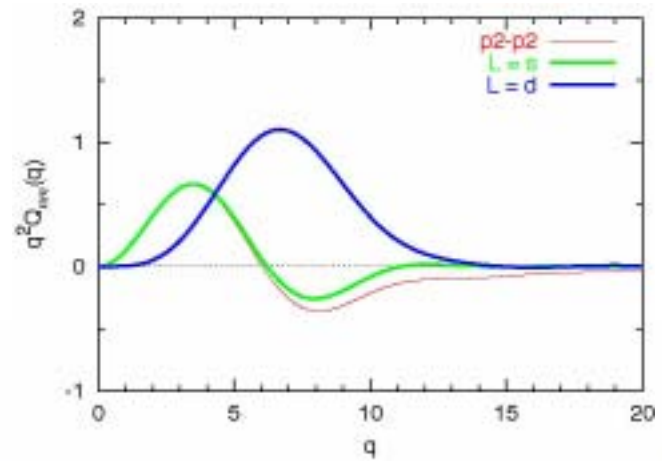
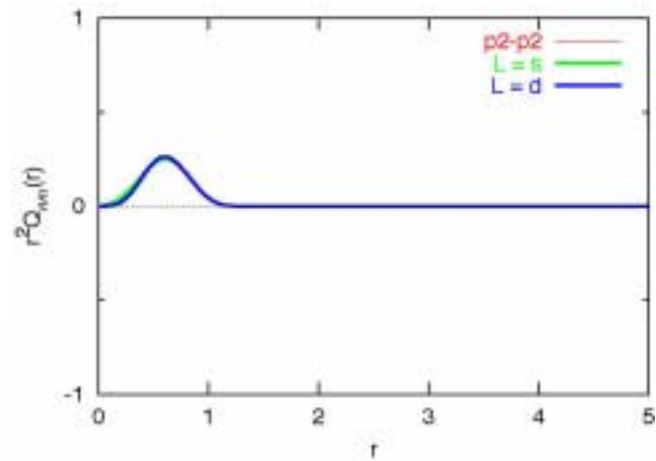
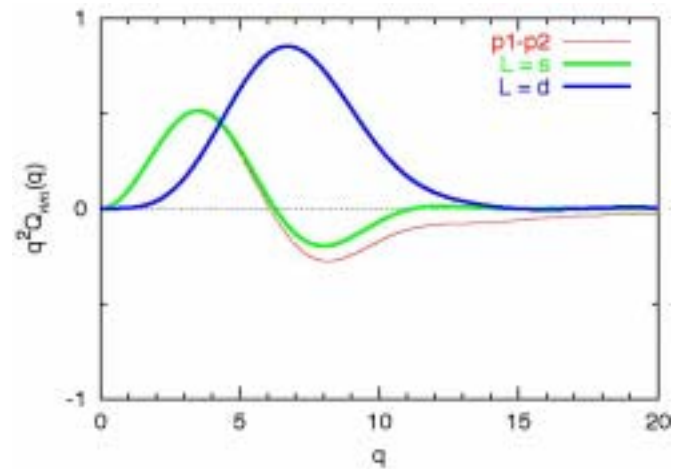
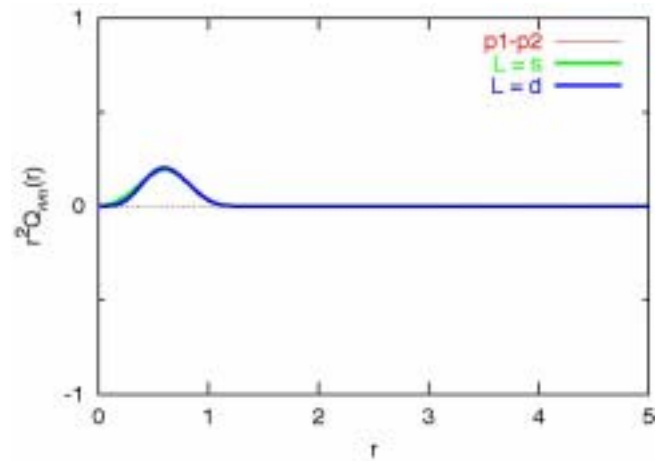
炭素原子のウルトラソフトPP作成



炭素原子のウルトラソフトPP作成



炭素原子のウルトラソフトPP作成



- 全電子計算
 - 相対論的スピン状態
 - 軌道間クーロンエネルギー
 - 擬原子
- 擬ポテンシャル計算
 - ゴースト解析
 - 擬ポテンシャルのスピン状態
 - Semicoreの計算

相対論的スピン状態

4価原子の安定スピン配置

${}^6\text{C}$, ${}^{14}\text{Si}$, ${}^{32}\text{Ge}$, ${}^{50}\text{Sn}$, ${}^{82}\text{Pb}$

	E _{tot} (Hartree)	
	p[up]-p[up]	p[up]-p[down]
C	-37.810353	-37.765242
Si	-289.866799	-289.838765
Ge	-2098.962253	-2098.941705
Sn	-6179.030497	-6179.023238
Pb	-20928.603765	-20928.633748

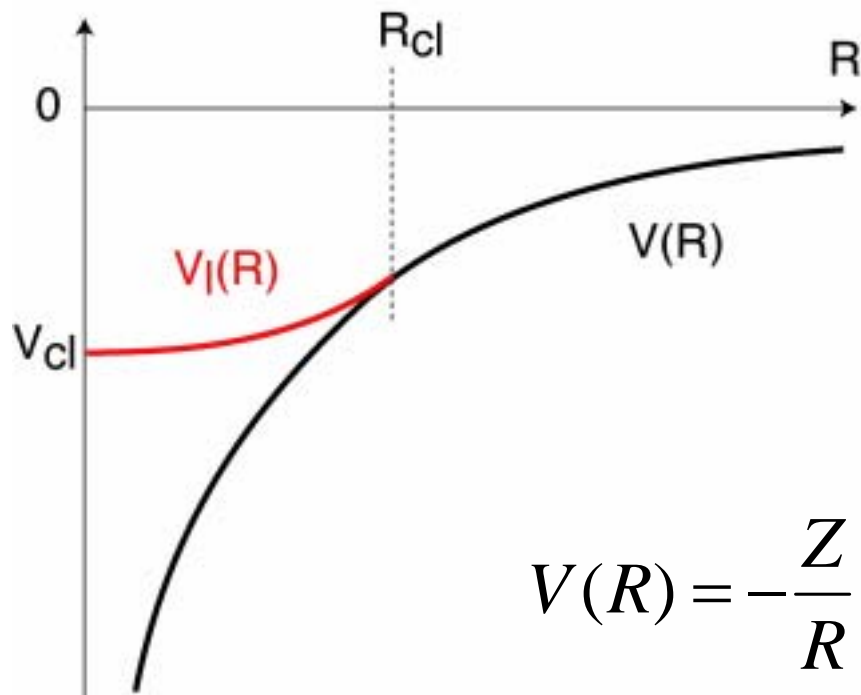
軌道間クーロンエネルギー

Mn

hubbard	symm	m	s	Energy (Ha)	Energy (eV)
hubbard	3d	-2	+	0.4008032512	10.9064109528
hubbard	3d	-1	+	0.3938263029	10.7165585378
hubbard	3d	0	+	0.4092844681	11.1371965987
hubbard	3d	1	+	0.3938263029	10.7165585378
hubbard	3d	2	+	0.4008032512	10.9064109528

hubbard	symm	m1	s1	m2	s2	Energy (Ha)	Energy (eV)
hubbard	3d	-2	+	-1	+	0.3783681377	10.2959204769
hubbard	3d	-2	+	0	+	0.3737168389	10.1693522003
hubbard	3d	-2	+	1	+	0.3783681377	10.2959204769
hubbard	3d	-2	+	2	+	0.4008032512	10.9064109528
hubbard	3d	-1	+	0	+	0.3876707354	10.5490570303
hubbard	3d	-1	+	1	+	0.3938263029	10.7165585378
hubbard	3d	-1	+	2	+	0.3783681377	10.2959204769
hubbard	3d	0	+	1	+	0.3876707354	10.5490570303
hubbard	3d	0	+	2	+	0.3737168389	10.1693522003
hubbard	3d	1	+	2	+	0.3783681377	10.2959204769

擬原子



$$V_l(0) = V_{cl}$$

$$V_l'(0) = 0$$

$$V_l^{(n)}(R_{cl}) = V^{(n)}(R_{cl})$$

$$n = 0, 1, 2, 3, 4$$

$$V(R) = -\frac{Z}{R}$$

$$V_l(R) = \sum_{k=0}^6 c_k R^{2k}$$

擬原子

擬Si

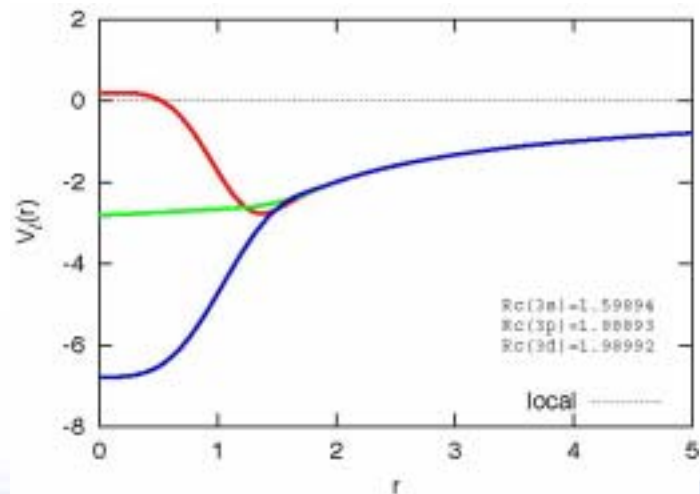
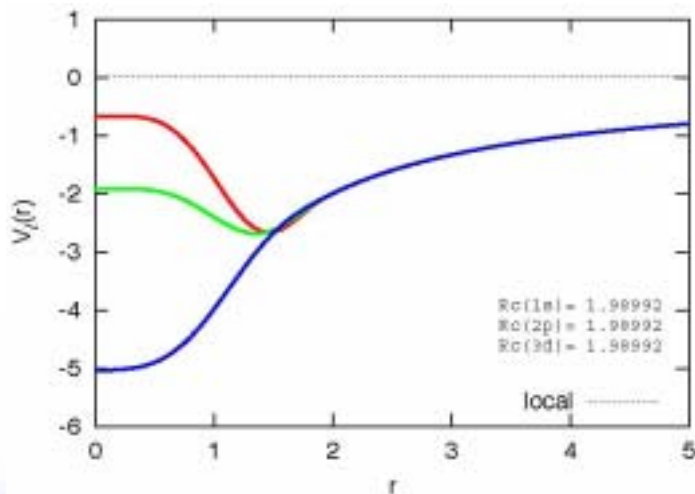
```
atom_number 4 4.0
electron_config 6 srel restricted
  1s 2.0 1
  2s 0.0 0
  2p 2.0 1
  3s 0.0 0
  3p 0.0 0
  3d 0.0 1
```

```
core_potential patom
lmax_core d
  s 2.00000 3.80000
  p 2.00000 1.40000
  d 2.00000 -6.79608
```

Si

```
atom_number 14 14.0
electron_config 6 srel restricted
  1s 2.0 1
  2s 2.0 1
  2p 6.0 1
  3s 2.0 1
  3p 2.0 1
  3d 0.0 0
```

```
pseudo_potential nc
local orbital d
orbitals 3
  3s 1.60
  3p 1.90
  3d 2.00
```



擬原子

擬Si

```
eng Energy levels for the present PP [Solved]
eng Element ---> P4
eng-----
eng  symm      Energy (eV)  nocc   focc
eng-----
eng  1s    -10.9080458180   2  2.00000
eng  2p     -4.1825332716   6  2.00000
eng-----
eng Total electrons           4.00000
eng-----
```

```
etot Total energy for the present PP [Solved]
etot-----
etot      Energy (eV)
etot-----
etot Ekin      34.2194793141
etot Eion[NL]   19.6546564358
etot Eion[LOC] -209.5916119384
etot Eh        79.8310057539
etot Exc       -26.1867933612
etot Epcc      0.0000000000
etot-----
etot Etot     -102.0732637959
etot Etot*    -102.0732258363
etot-----
```

Si

```
eng Energy levels for the present PP [Solved]
eng Element ---> Si
eng-----
eng  symm      Energy (eV)  nocc   focc
eng-----
eng  3s    -10.8791432071   2  2.00000
eng  3p     -4.1628193843   6  2.00000
eng-----
eng Total electrons           4.00000
eng-----
```

```
etot Total energy for the present PP [Solved]
etot-----
etot      Energy (eV)
etot-----
etot Ekin      34.9505173093
etot Eion[NL]   25.8203607648
etot Eion[LOC] -216.5029527275
etot Eh        79.9104820964
etot Exc       -26.2226010302
etot Epcc      0.0000000000
etot-----
etot Etot     -102.0441935872
etot Etot*    -102.0441762551
etot-----
```

ノルム保存のゴースト解析

Cu

ゴースト状態の解析

Local-d
NC

Kleinman-Bylander energies : E[KB](l,loc)

	s	p	d
s	0.000000	1.824183	-10.094609
p	-5.430575	0.000000	-8.683856
d	11.712881	8.124610	0.000000
present	11.712881	8.124610	0.000000

Kleinman-Bylander local energy levels : Eloc[KB](i,l)

	s	p	d
local-1	-8.075110	-4.007712	-0.195674
local-2	-0.588403	-0.017156	0.000000
E[KB]	+	+	0
eigen	-0.178544	-0.028740	-0.195673
ghost	exists	none	none

```
#####  
### A ghost state must exist ###  
#####
```

ゴーストあり

ノルム保存のゴースト解析

Cu

ゴースト状態の解析

Local-s
NC

Kleinman-Bylander energies : E[KB](l,loc)

	s	p	d
s	0.000000	1.824183	-10.094609
p	-5.430575	0.000000	-8.683856
d	11.712881	8.124610	0.000000
present	0.000000	1.824183	-10.094609

Kleinman-Bylander local energy levels : Eloc[KB](i,l)

	s	p	d
local-1	-0.178545	-0.033774	0.000000
local-2	-0.000297	0.000000	0.000000
E[KB]	0	+	-
eigen	-0.178544	-0.028740	-0.195673
ghost	none	none	unknown

ゴーストなし

ノルム保存のゴースト解析

Cu

ゴースト状態の解析

Local-p
NC

Kleinman-Bylander energies : E[KB](l,loc)

	s	p	d
s	0.000000	1.824183	-10.094609
p	-5.430575	0.000000	-8.683856
d	11.712881	8.124610	0.000000
present	-5.430575	0.000000	-8.683856

Kleinman-Bylander local energy levels : Eloc[KB](i,l)

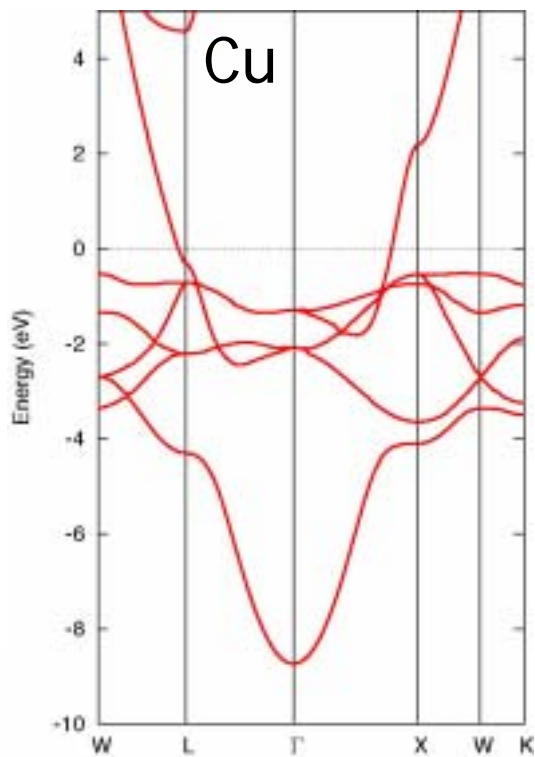
	s	p	d
local-1	-0.185191	-0.028739	0.000000
local-2	-0.000623	0.000000	0.000000
E[KB]	-	0	-
eigen	-0.178544	-0.028740	-0.195673
ghost	exists	none	unknown

```
#####  
### A ghost state must exist ###  
#####
```

ゴーストあり

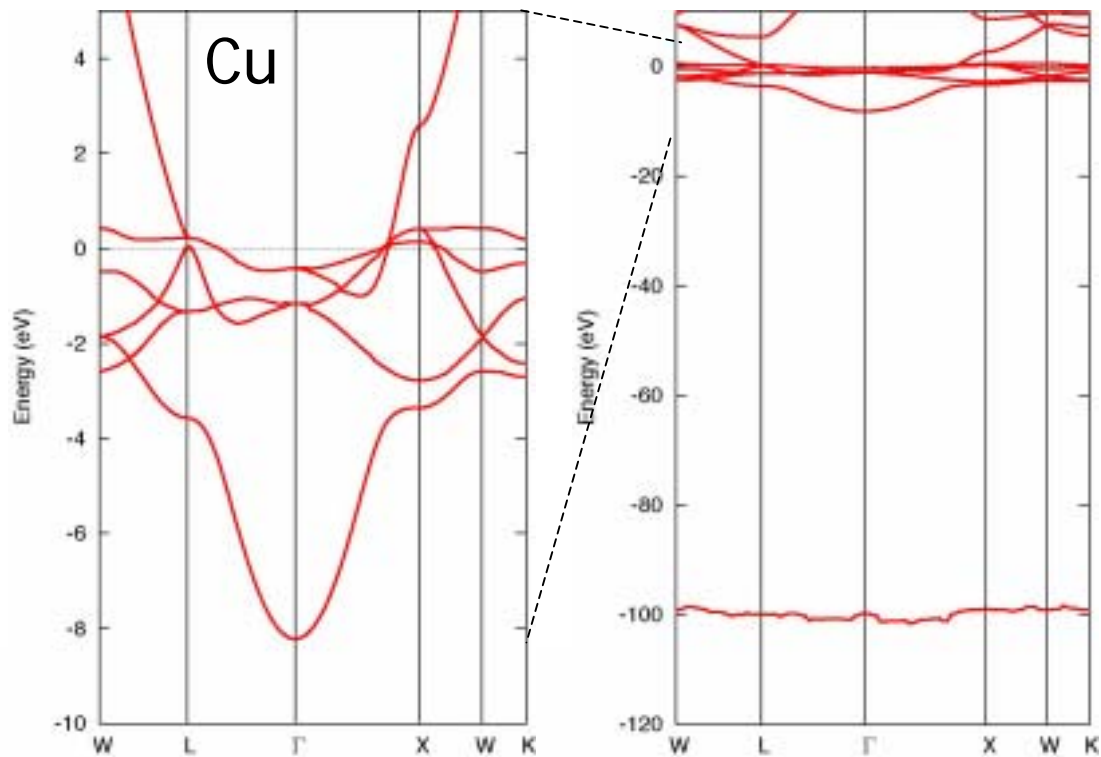
ウルトラソフトのゴーストバンド図

ゴーストなし ←



Local-s, Ultrasoft

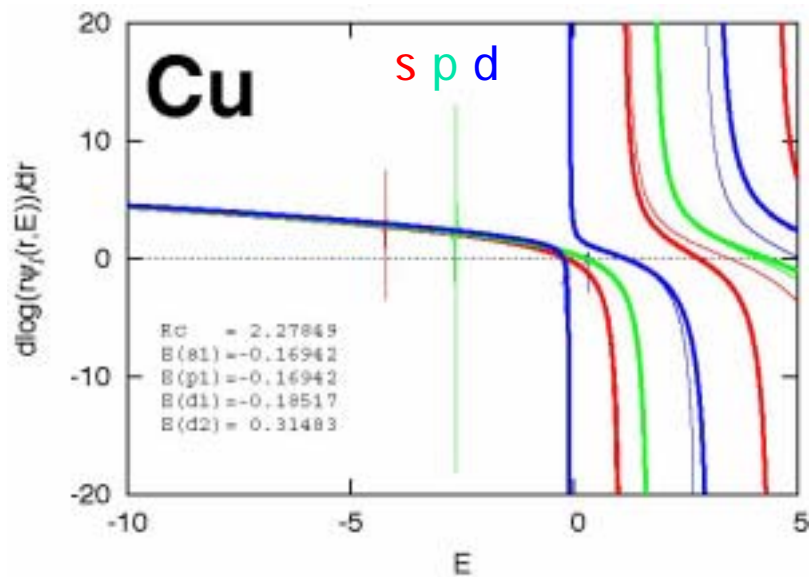
→ ゴーストあり



Local-p, Ultrasoft

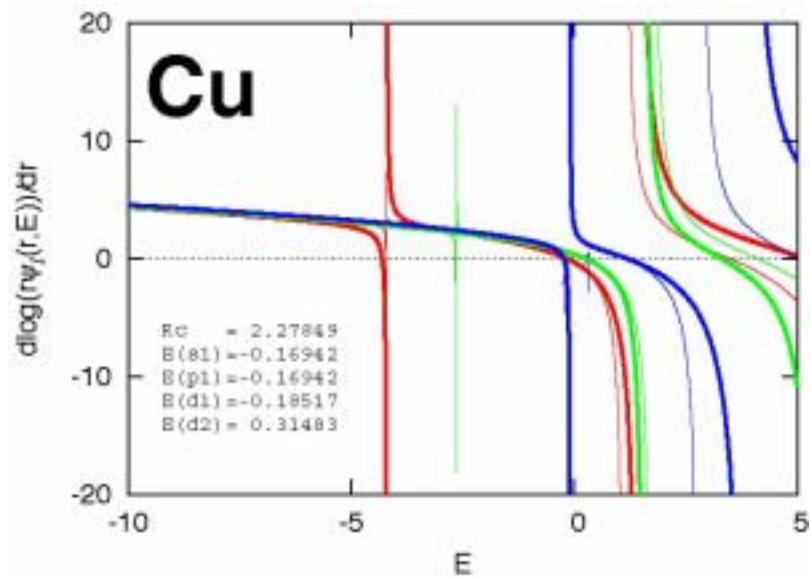
ウルトラソフトのゴーストの対数微分

ゴーストなし



Local = s
Ultrasoft

ゴーストあり



Local = p
Ultrasoft

ハルム保存のスピ状態

分離型擬ポテンシャルを解き直した電子状態

C

```
eng-----  
eng  symm  s      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc  focc  
eng-----  
eng  2s    +      -0.5331822223    -14.5086258946  1  1.00000  
eng  2s    -      -0.4286096698    -11.6630620721  1  1.00000  
eng  2p    +      -0.2291098864     -6.2343969683  3  2.00000  
eng  2p    -      -0.1327984078     -3.6136283940  3  0.00000  
eng-----  
eng  Number of electrons (+)                      3.00000  
eng              (-)                            1.00000  
eng-----
```

```
etot Total energy for the present PP [Solved]  
etot-----  
etot      Energy (Ha)      Energy (eV)  
etot-----  
etot Ekin      3.2657486778      88.8655394910  
etot Eion[NL]   0.4909707270      13.3599927093  
etot Eion[LOC] -12.1367327648     -330.2572889711  
etot Eh        4.4212258888      120.3076729353  
etot Exc       -1.4370418554     -39.1038969456  
etot Epcc      0.0000000000      0.0000000000  
etot-----  
etot Etot      -5.3958293265     -146.8279807811  
etot Etot*     -5.3958280015     -146.8279447262  
etot-----
```

ウルトラソフトのスピンの状態

分離型擬ポテンシャルを解き直した電子状態

C

```
eng-----  
eng  symm  s      Energy (Ha)      Energy (eV)  nocc  focc  
eng-----  
eng  2s    +      -0.5415510001    -14.7363519154  1  1.00000  
eng  2s    -      -0.4241030342    -11.5404302809  1  1.00000  
eng  2p    +      -0.2273294766     -6.1859495539  3  2.00000  
eng  2p    -      -0.1449191190     -3.9434497157  3  0.00000  
eng-----  
eng  Number of electrons (+)                      3.00000  
eng                      (-)                      1.00000  
eng-----
```

```
etot Total energy for the present PP [Solved]  
etot-----  
etot      Energy (Ha)      Energy (eV)  
etot-----  
etot Ekin      2.6740053413      72.7633846630  
etot Eion[NL]   1.1000817884       29.9347473585  
etot Eion[LOC] -12.1456419203    -330.4997194171  
etot Eh       4.4064447194     119.9054568672  
etot Exc     -1.4319980199    -38.9666472045  
etot Epcc     0.0000000000     0.0000000000  
etot-----  
etot Etot     -5.3971080911    -146.8627777329  
etot Etot*    -5.3829119479    -146.4764810393  
etot-----
```

Semicoreの計算

Ce

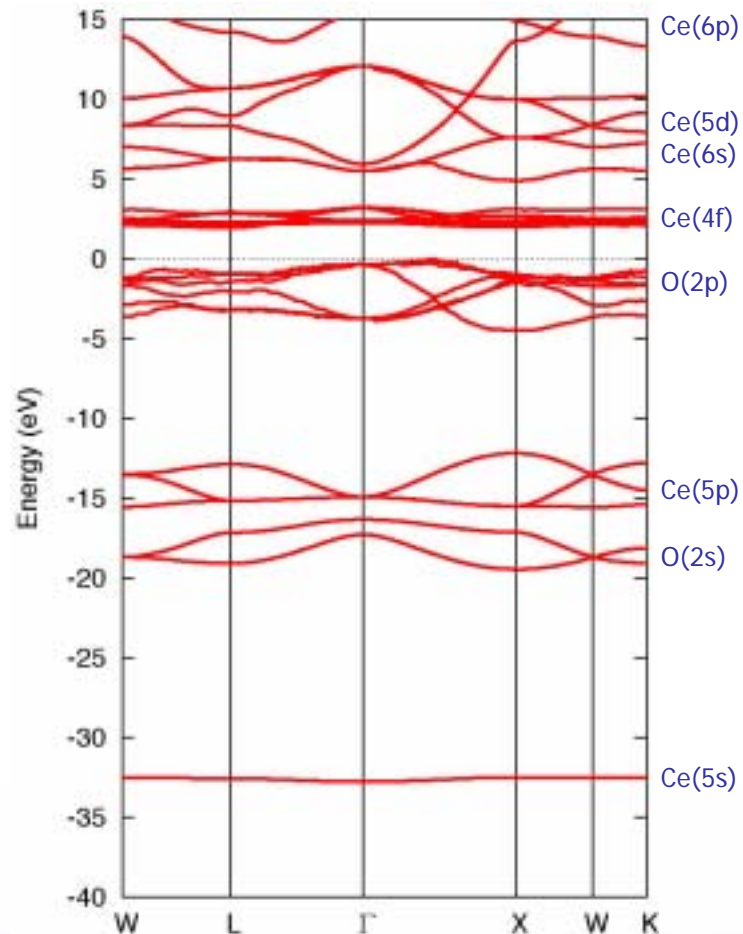
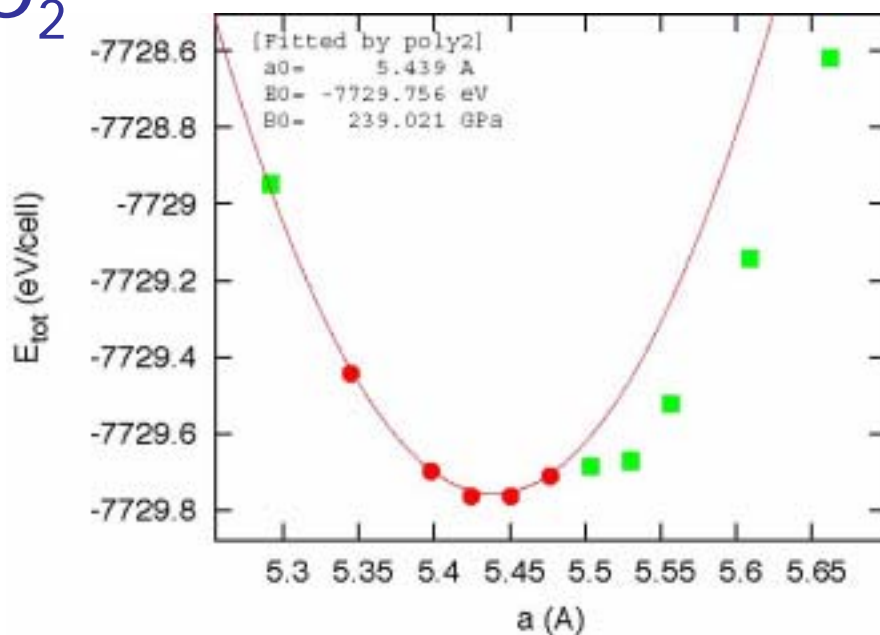
Semicore
state

```
pseudo_potential general
local orbital d
orbitals 6
5s us 1
2.20 0.0 1.1
5p us 1
2.20 0.0 1.1
5d nc 1
2.50 0.0 1.1
4f us 1
2.30 0.0 1.1
6s us 1
2.50 0.0 1.1
6p us 1
2.50 0.0 1.1
phi_np 5
phi_gmesh 400 5.5 40.0
qps_np 4
qps_gmesh 400 18.0 40.0
```

```
deficit_charge angular
lmax_qps 6
0 1.10
1 1.10
2 1.10
3 1.10
4 1.10
5 1.35
6 1.35
```

Semicoreの計算

CeO₂



$$G_{wf} = 6.3$$

$$G_{chg} = 20$$

	a_0 (Å)	B_0 (Gpa)
Calc	5.439	239
Exp	5.411	236

- PAWの作成

CIAOとPPのダウンロード

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software/index.html>

JAPANESE ENGLISH

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
Frontier Simulation Software for Industrial Science

- ホーム
- 研究成果
- ニュース
- イベントカレンダー
- ソフトウェアの公開
- 研究テーマ
- プロジェクトの概要
- メンバーと人材育成

- IIS
- リンク
- サイトマップ

所内向け案内
所内関係者のみ

東京大学生産技術研究所
計算科学技術基盤研究センター
〒153-8505
東京都目黒区駒場4-6-1

ソフトウェアの公開 Software Publication

現在公開中のソフトウェアは以下の通りです。「ダウンロードページ」ボタンをクリックすると、各グループのソフトウェアをダウンロードするための画面に進みます。

次世代量子化学計算

- (1) 大規模タンパク質の量子化学計算ソフト [詳細情報](#)
[Protein DF]

[ダウンロードページ](#)

タンパク質・化学物質相互作用解析

- (1) ab initio FMO法対応 解析ソフト [詳細情報](#)
[ABINIT-MP]
- (2) ABINIT-MP解析結果可視化ソフト [詳細情報](#)
[BioStation Viewer]

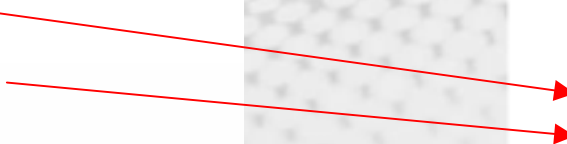
[ダウンロードページ](#)

ナノシミュレーション

- (1) 第一原理擬ポテンシャルバンド計算ソフト [詳細情報](#)
[PHASE] [詳細情報](#)
[CIAO] [詳細情報](#)
[擬ポテンシャルデータ] [詳細情報](#)
- (2) 第一原理全電子バンド計算ソフト [詳細情報](#)
[ABCAP]

[ダウンロードページ](#)

CIAO
PP



- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
- [3] D. Liberman, J. T. Waber, and D. T. Cromer, Phys. Rev. 137, A27 (1965).
- [4] G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, Phys. Rev. B 26, 4199 (1982).
- [5] D. D. Koelling and B. N. Harmon, J. Phys. C 10, 3107 (1977).
- [6] E. Engel, T. Auth, and R. M. Dreizler, Phys. Rev. B 64, 235126 (2001).
- [7] E. K. Gross and R. M. Dreizler, Phys. Rev. A 20, 1798 (1979).
- [8] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992).
- [9] J. P. Perdew, K. Bulke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- [10] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 41, 7892 (1990).
- [11] N. Troullier and J. L. Martins, Phys. Rev. B 43, 1993 (1991).
- [12] K. Laasonen et al, Phys. Rev. B 47, 10142 (1993).
- [13] D. R. Hamann, Phys. Rev. B 40, 2980 (1989).
- [14] A. G. Louie, S. Froyen, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 26, 1738 (1982).
- [15] X. Gonze, R. Stumpf, and M. Scheffler, Phys. Rev. B 44, 8503 (1991).
- [16] A. M. Rappe et al, Phys. Rev. B 41, 1227 (1990).
- [17] P. E. Blöchl, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994).